



# Propriétés optoélectroniques de LEDs à nanofils coeur-coquille InGaN/GaN

Pierre Lavenus

## ► To cite this version:

Pierre Lavenus. Propriétés optoélectroniques de LEDs à nanofils coeur-coquille InGaN/GaN. Physique [physics]. Université Paris Sud - Paris XI, 2015. Français. NNT : 2015PA112227 . tel-01314128

**HAL Id: tel-01314128**

**<https://theses.hal.science/tel-01314128>**

Submitted on 10 May 2016

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



UNIVERSITÉ PARIS SUD  
ÉCOLE DOCTORALE STITS  
UFR SCIENTIFIQUE D'ORSAY



# THÈSE

présentée par

**Pierre LAVENUS**

pour obtenir le titre de

**Docteur en Sciences**

de l'Université Paris-Sud

**Spécialité : Physique**

## **Propriétés optoélectroniques de LEDs à nanofils cœur-coquille InGaN/GaN**

Thèse soutenue le 22 septembre 2015 à l'Institut d'Electronique  
Fondamentale

### **Membres du jury :**

Jean-Yves DUBOZ	<i>Rapporteur</i>
Joël EYMERY	<i>Membre invité</i>
Martin FOLDYNA	<i>Examineur</i>
Frank GLAS	<i>Rapporteur</i>
François JULIEN	<i>Directeur</i>
Odile STEPHAN	<i>Examinatrice</i>
Maria TCHERNYCHEVA	<i>Co-directrice</i>



# Remerciements

---

Je voudrais tout d'abord adresser mes plus profonds remerciements à ma directrice de thèse, Maria Tchernycheva, pour ses conseils, ses compétences et la confiance dont elle m'a témoigné tout au long de ma thèse. Les années passées en sa compagnie furent scientifiquement enthousiasmantes et humainement très agréables. Je lui suis extrêmement reconnaissant de son soutien, en particulier dans les situations où des choix déterminants étaient à faire. Un grand merci également pour sa patience et ses encouragements lors de la phase de rédaction.

Je tiens également à exprimer ma gratitude à François Julien pour son expertise et ses nombreux conseils. Merci pour son optimisme communicatif et son humour, présent quelle que soit la situation.

Je souhaite par ailleurs remercier Odile Stéphan d'avoir accepté de présider mon jury de soutenance et suis reconnaissant envers Jean-Yves Duboz et Frank Glas, rapporteurs de ce manuscrit, pour le temps qu'ils ont consacré à l'examen de mes travaux et pour leurs commentaires pertinents et constructifs. Je remercie également Martin Foldyna et Joël Eymery pour leur participation à mon jury de thèse en tant qu'examineur et membre invité.

Le travail présenté dans ce manuscrit doit beaucoup aux personnes qui m'ont précédé dans l'équipe. A ce titre, je remercie chaleureusement Andres de Luna Bugallo, Gwénolé Jacopin, et Lorenzo Rigutti avec qui ça a été un grand plaisir de travailler.

Je tiens à adresser un grand merci à Salam pour toutes nos discussions diverses et variées ainsi que pour son rôle central dans l'organisation des soirées Photis. Merci à l'ensemble de l'équipe ex-Photis, pour son excellente ambiance.

Je remercie par ailleurs les directeurs successifs de l'Institut d'Electronique Fondamentale, Claude Chappert et André de Lustrac, de m'avoir accueilli dans ce laboratoire.

Je remercie également le personnel de la Centrale Technologique Universitaire dans laquelle j'ai fabriqués les échantillons, et en particulier Fabien Bayle, pour son expertise en microscopie électronique et l'aide qu'il m'a apportée dans les mesures EBIC, et Jean-René Coudeville pour ses conseils de process.

Mes remerciements vont aussi aux équipes avec qui j'ai eu la chance de collaborer durant ma thèse. En particulier, je souhaite témoigner de ma gratitude envers Agnès Messanvi, Joël Eymery et Christophe Durant du CEA de Grenoble qui ont épitaxié une partie significative des nanofils que j'ai étudiés au cours de ma thèse. Je remercie également Luiz-Fernando Zagonel et Matthieu Kociak pour leurs très belles mesures de cathodoluminescence, ainsi que Nicolas Cavassilas pour m'avoir offert l'opportunité de découvrir, dans son laboratoire, pendant une semaine le monde de la modélisation du transport électronique quantique.



# Table des Matières

Introduction générale.....	7
----------------------------	---

CHAPITRE 1	
Caractérisation des propriétés de transport de nanofils cœur-coquille par mesure de caractéristiques courant-tension et spectroscopie	

1	Dispositifs semi-conducteurs à base de jonction p-n.....	13
1.1	Jonction p-n à l'équilibre .....	13
1.2	Jonction p-n et LED hors équilibre.....	17
1.2.1	Modèle de Shockley .....	17
1.2.2	Présence de puits quantiques au sein de la ZCE (structure de type LED) .....	20
1.2.3	Recombinaison Shockley-Read-Hall dans la ZCE .....	23
1.2.4	Courant tunnel assisté par les défauts .....	27
1.3	Influence des contacts sur la caractéristique courant-tension .....	30
2	Croissance et structure des échantillons.....	32
2.1	Hétérostructure à puits quantiques .....	32
2.2	Hétérostructure à segment radial large .....	34
3	Caractérisation optique des nanofils.....	35
3.1	Hétérostructure à puits quantiques .....	35
3.1.1	Cathodoluminescence (CL) .....	35
3.1.2	Micro-photoluminescence ( $\mu$ PL) .....	41
3.2	Hétérostructure à segment large .....	42
4	Fabrication des dispositifs à nanofil unique .....	43
5	Caractérisation électrique .....	44
5.1	Hétérostructure à segment large .....	44
5.1.1	Courant de fuite en inverse .....	45
5.1.2	Courant en polarisation directe .....	52
5.2	Hétérostructure à puits quantiques .....	61
5.2.1	Mesures à température ambiante en fonction de la tension appliquée .....	61
5.2.2	Comportement de l'EL en fonction de la température .....	63
5.2.3	Modèle fondé sur l'inhomogénéité d'injection dans les puits quantiques.....	64
5.2.4	Modèle fondé sur le transport des porteurs de charges dans les puits quantiques.	72
6	Conclusion .....	82

Annexe I-A Modèle déterminant l'expression du courant de fuite par effet tunnel assisté par des défauts dans une jonction p-n polarisée en inverse ..... 83

Annexe I-B Dérivation analytique de la densité des porteurs injectés ponctuellement dans les puits en présence d'un champ effectif en régime de faible injection..... 87

<p style="text-align: center;"><b>CHAPITRE 2</b></p> <p style="text-align: center;"><b>Caractérisation des propriétés de transport des nanofils cœur-coquille par mesures de courant induit par faisceau d'électrons (EBIC)</b></p>
---

1	Introduction .....	91
2	Mesures EBIC.....	94
2.1	Montage expérimental.....	94
2.2	Origine du courant induit par faisceau d'électron .....	95
2.2.1	Interactions du faisceau d'électrons avec la matière et génération de paires électron/trou .....	96
2.2.2	Collecte des porteurs générés par la jonction p-n .....	104
2.2.3	Transport des porteurs jusqu'aux contacts.....	109
2.3	Résultats expérimentaux.....	110
2.3.1	Influence de la tension d'accélération $V_{acc}$ .....	110
2.3.2	Influence de la polarisation inverse de la jonction ( $U < 0$ ) .....	118
2.3.3	Influence de la polarisation directe de la jonction ( $U > 0$ V) .....	121
3	Modélisation des propriétés de transport des porteurs majoritaires .....	123
3.1	Influence de la résistance de la coquille.....	125
3.2	Influence du courant d'illumination.....	127
3.3	Influence de la tension appliquée .....	127
3.4	Influence d'une résistance en série avec le dispositif .....	127
3.5	Influence de la résistance du cœur .....	128
3.6	Modulation de la résistance de la coquille sous l'effet de l'excitation par le faisceau d'électrons.....	129
3.7	Influence des fuites distribuées le long du fil.....	130
3.8	Influence d'une fuite par un défaut ponctuel .....	132
4	Comparaison entre les résultats théoriques et expérimentaux.....	134
5	Conclusion .....	138

Annexe II-A - Algorithme de la modélisation du transport des porteurs majoritaires dans une structure cœur-coquille de type jonction p-n - ..... 142

Annexe II-B - Détermination analytique de la distance seuil au-delà de laquelle le signal EBIC décroît de façon significative dans le régime de la redistribution du courant dominée par les diodes - .....	147
Annexe II-C - Détermination de la solution analytique donnant le profil EBIC dans le régime dominé par les fuites - .....	152
Annexe II-D - Détermination du profil EBIC en présence d'un défaut ponctuel et application à la détermination expérimentale du profil de résistivité du cœur et de la coquille - .....	156
Annexe II-E - Méthode expérimentale pour déterminer les profils de résistivité du cœur et de la coquille d'un nanofil - .....	163
Annexe II-F - Collecte de la jonction en présence de recombinaison de surface – .....	166
<b>Conclusion générale.....</b>	<b>170</b>
Bibliographie.....	172
Publications .....	181

## Introduction générale

Les nanofils semi-conducteurs sont des structures cristallines dont la longueur est comprise entre quelques centaines de nanomètres et quelques centaines de microns, et dont le diamètre varie entre quelques nanomètres et quelques centaines de nanomètres. Bien que les premières recherches sur la croissance des nanofils datent du milieu des années 60 avec la découverte de la méthode Vapor-Liquid-Solid (VLS) par Wagner et Ellis [1], le domaine des nanofils semi-conducteurs n'a commencé à émerger que dans les années 90 suite au travail des scientifiques d'Hitachi qui ont fait la démonstration de la première jonction p-n dans des nanofils hétérostructurés [2]. La recherche sur les nanofils a connu à partir des années 2000 un développement rapide grâce aux avancées qui ont permis de contrôler plus précisément la croissance des nanofils [3]–[6] : il est désormais possible d'élaborer des fils de diamètre nanométrique, de les organiser, d'en contrôler le dopage et d'y incorporer des hétérostructures. Lorsque la composition du nanofil varie le long de son axe, on parle d'hétérostructures *axiales* et on forme alors des disques quantiques. Une hétérostructure *radiale* ou « *cœur-coquille* » correspond en revanche à une variation de la composition orthogonalement à l'axe du fil : on crée alors des puits quantiques.

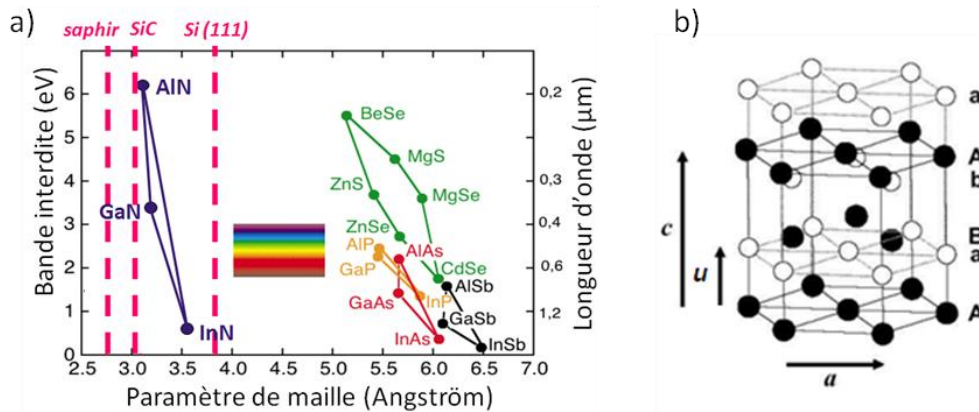
Une question qui se pose naturellement concerne les raisons qui ont amené la communauté scientifique à s'intéresser aux nanofils: quelles différences fondamentales y a-t-il entre les nanofils semi-conducteurs et leur équivalent en couche mince ? On peut en fait distinguer trois points:

- Tout d'abord, une première différence vient du confinement qui peut se faire selon deux dimensions dans les fils contre une dans les couches minces. Le confinement concerne à la fois les porteurs de charges, les phonons et les photons mais il ne joue véritablement un rôle que lorsque le diamètre du nanofil devient inférieur à certaines grandeurs caractéristiques telles que le rayon de Bohr des excitons pour les porteurs de charge [7], le libre parcours moyen pour les phonons [5] ou la longueur d'onde pour les photons [8].
- Ensuite, les nanofils se distinguent de leur équivalent en couches minces par leur plus grand rapport surface/volume, ce qui accroît notamment leur sensibilité à l'environnement [6] et leur gain photoconducteur [9].
- Un dernier aspect concerne la relaxation des contraintes sur les bords lors de la croissance des nanofils [10], [11]. Cela permet d'obtenir en principe des structures cristallines sans dislocation même lorsqu'on utilise des substrats à fort désaccord de maille. Il est donc envisageable d'intégrer sur silicium des composants optoélectroniques à base de nanofils. De plus, il est possible de synthétiser des hétérostructures ayant des compositions inaccessibles avec des couches minces.

Les spécificités des nanofils peuvent être exploitées dans de nombreux domaines soit pour améliorer les performances et/ou la compacité des composants actuels soit pour développer des composants nanométriques offrant de nouvelles fonctionnalités. En électronique par exemple, le groupe de Lieber a ainsi démontré qu'en contactant un nanofil unique de silicium dopé dispersé sur un substrat Si/SiO<sub>2</sub>, on pouvait réaliser un transistor à effet de champ dont les performances égalent celles des meilleurs transistors en couche mince. En fonctionnalisant ce même fil avec des récepteurs spécifiques d'une protéine, on peut également réaliser un détecteur d'espèces biologiques sensible à des concentrations de l'ordre du pg/mL [6]. Les nanofils suscitent également beaucoup d'intérêt dans d'autres domaines. Leur grand rapport d'aspect est intéressant pour réaliser des cellules solaires à haut rendement. En biologie, les nanofils peuvent être utilisés pour l'interfaçage avec des cellules

vivantes [5]. Les nanofils ouvrent par ailleurs la voie à de nouveaux composants optoélectroniques, à savoir des nano-émetteurs de lumière qui seraient des briques de base de systèmes de traitement d'information, d'imagerie, d'analyse biochimique etc. [5]. Mais, c'est sur les diodes électroluminescentes (LEDs) que nous allons désormais nous focaliser.

Les nanofils ont en effet des caractéristiques prometteuses pour améliorer le rendement des LEDs, et tout particulièrement celui des LEDs en nitrure. Les nitrures d'éléments III, à savoir GaN, InN, AlN et leurs alliages, forment une famille de matériaux semi-conducteurs dont les propriétés sont particulièrement intéressantes pour la réalisation de composants optoélectroniques. Outre le fait que ces matériaux soient résistants aux radiations, aient une bonne conductivité thermique, des champs de claquage élevés et une bonne stabilité mécanique, leur intérêt réside surtout dans leur bande interdite qui est directe et qui couvre une large bande spectrale de l'infrarouge (0,65eV pour InN) à l'ultraviolet (6,2eV pour AlN). Ceci est illustré dans la Figure 1 qui montre l'énergie de bande interdite de plusieurs familles de semi-conducteurs en fonction de leur paramètre de maille. Cette figure met également en évidence une difficulté intrinsèque aux nitrures : ces derniers présentent un fort désaccord de maille avec des substrats tels que le saphir, le SiC ou le silicium, ce qui engendre lors de leur synthèse par hétéro-épitaxie de fortes contraintes qui en se relaxant conduisent à une densité importante de dislocations dans les structures planaires. Ce problème de qualité cristalline a été un frein majeur pour le développement des composants optoélectroniques à base de nitrures. Depuis quelques années, il existe des substrats de GaN massif pour réaliser de l'homo-épitaxie mais ces substrats demeurent très coûteux. Les nanofils offrent cependant une solution pour contourner cette difficulté. Pour bénéficier pleinement du phénomène de relaxation des contraintes et obtenir une structure cristalline sans dislocation, il est cependant nécessaire d'avoir des nanofils de faible diamètre (de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres), ce diamètre critique étant d'autant plus faible que le désaccord de maille avec le substrat est important. Une des stratégies désormais couramment utilisée pour obtenir des nanofils de dimension contrôlée et de bonne qualité cristalline s'inspire de la technique de croissance épitaxiale latérale (*Lateral Epitaxial Overgrowth*) utilisé pour les couches minces et est appelé *Selective Area Growth* [12]: elle consiste à masquer la surface du substrat à l'aide d'une couche mince de matériau amorphe ( $\text{SiO}_2$  ou  $\text{Si}_3\text{N}_4$  généralement). Des ouvertures de quelques dizaines à quelques centaines de nanomètres de diamètres sont ensuite réalisées dans le masque. Lors de l'épitaxie, des conditions expérimentales bien choisies permettent de ne faire croître le cristal que dans ces ouvertures pour obtenir des nano-colonnes monocristallines. Les conditions de croissance sont ensuite modifiées afin de promouvoir la croissance latérale du cristal et élargir ainsi le diamètre des nanofils. Les dislocations résiduelles sont préférentiellement orientées dans la direction orthogonale à la surface de l'échantillon et se trouvent donc principalement à l'aplomb des ouvertures. Le matériau épitaxié latéralement bénéficie donc généralement d'une qualité cristalline améliorée. On voit donc ici un premier avantage à utiliser des nanofils à hétérostructures cœur-coquille pour la réalisation de diodes électroluminescente.



**Figure 1 a) Bande interdite de plusieurs familles de semi-conducteurs en fonction de leur paramètre de maille. Les traits pointillés indiquent les paramètres de maille de trois substrats utilisés pour la croissance des nitrures d'élément b) Schéma de la structure wurtzite. En blanc: atomes d'azote. En noir: atomes de Ga, In ou Al**

Un deuxième avantage est lié à la nature polaire des nitrures. Les nitrures d'éléments III cristallisent en effet sous forme hexagonale (structure wurtzite)<sup>1</sup>. Cette structure est composée de deux sous-réseaux hexagonaux compacts décalés d'un vecteur  $\vec{u}$  le long de l'axe  $c$ : selon ce même axe, elle peut donc être décrite comme un empilement de bicouches Aa-Bb (cf. Figure 1b). La structure wurtzite n'a pas de centre d'inversion, ce qui rend les directions  $[0001]$  et  $[000\bar{1}]$  non équivalentes. L'absence de centre d'inversion associée à la forte polarité de la liaison métal-azote est aussi responsable de la polarisation électrique géante des nitrures d'élément III [13]. La plupart des LEDs en nitrure réalisées en couche mince sont épitaxiées le long de la direction  $c$ . La différence de polarisation entre le GaN et l'InGaN induit un fort champ électrique dans les puits quantiques. Ce champ sépare spatialement les électrons des trous, ce qui engendre un mauvais recouvrement des fonctions d'onde de ces deux types de porteur et dégrade ainsi l'efficacité quantique interne du dispositif. Dans les nanofils cœur-coquille orientés suivant l'axe  $c$  de la structure wurtzite, l'hétérostructure peut être épitaxiée sur les plans  $m$  non polaire du GaN, ce qui permet d'éviter l'apparition de ce fort champ interne.

L'utilisation de nanofils à hétérostructure cœur-coquille permet de plus d'augmenter la surface effective du dispositif. La surface active du dispositif à nanofils est en effet égale à la surface cumulée de tous les nanofils, qui peut-être bien plus grande que la surface réelle du dispositif. Pour un même courant total injecté, la densité de courant sera donc moindre dans le dispositif à nanofils que dans son équivalent en couche mince. Cela permet donc d'améliorer le rendement des LEDs en retardant l'apparition des recombinaisons Auger qui sont responsables de la chute d'efficacité à fort courant d'injection (*efficiency droop*)[14].

Mentionnons enfin un dernier avantage des nanofils pour la réalisation de LEDs : les nanofils agissent comme des guides d'ondes et procurent naturellement une structuration de surface qui améliore l'efficacité d'extraction des photons [15]. Cela évite donc de coûteuses étapes de structuration de surface, nécessaires dans les LEDs planaires.

<sup>1</sup> Les nitrures d'éléments III cristallisent aussi sous forme cubique (structure blende) mais cette structure est thermodynamiquement métastable.

Au milieu des années 2000, lors de la montée en puissance du domaine de recherche sur les LEDs à nanofils, des premiers résultats très prometteurs ont rapidement été publiés : en 2005, le groupe de Lieber a fait par exemple la démonstration de nanoLEDs couvrant l'ensemble du spectre visible en utilisant des nanofils en structure cœur-coquille à multi-puits quantiques InGaN/GaN [16]. En exploitant le contraste d'indice optique entre le nanofil et l'extérieur pour faire une cavité photonique, il a également été démontré qu'il était possible de faire un nano-laser à fil unique pompé optiquement [17]. Depuis quelques années, les industriels s'intéressent fortement aux LEDs à nanofils. De grands groupes tels qu'Osram, et des start-up comme Aledia, issue du CEA de Grenoble, ou GLO AB (entreprise américano-suédoise) cherchent à mettre au point des LEDs à nanofils.

Malgré ces perspectives très prometteuses, des défis restent encore à relever. L'un d'entre eux est notamment le contrôle de l'homogénéité des propriétés structurales d'un nanofil à l'autre mais également au sein d'un même fil. Dans ce contexte, mon travail de thèse est centré sur l'étude de propriétés optoélectroniques de LEDs à nanofils possédant une hétérostructure cœur-coquille InGaN/GaN. J'ai cherché à identifier l'impact d'inhomogénéités structurales (dopage, qualité cristalline, composition des puits quantiques) sur les propriétés de transport des porteurs de charges dans ces structures.

Dans le **chapitre 1**, je discuterai tout d'abord de l'analyse des courbes courant-tension de dispositifs à nanofil unique, avec comme objectif d'identifier les mécanismes de conduction dominants et les effets liés à la répartition non homogène du courant dans le nanofil. La deuxième thématique du chapitre concerne la caractérisation par spectroscopie d'électroluminescence de nanofil possédant à la fois une hétérostructure radiale et axiale. Je présenterai notamment des modèles qui permettent de comprendre la façon dont se répartit le courant dans ce type de structure et comment cette répartition évolue avec la température et la tension appliquée.

Le **chapitre 2** est consacré à la caractérisation de nanofils cœur-coquille par la méthode de courant induit par faisceau d'électrons (*Electron Beam Induced Current*). Cette méthode existe depuis plusieurs décennies et a notamment été beaucoup exploitée par l'industrie des semi-conducteurs pour mettre en évidence des défauts structuraux. Elle n'avait cependant jamais été appliquée à l'étude de nanofils cœur-coquille. Dans ce chapitre, je développerai notamment un modèle permettant d'interpréter les cartographies EBIC mesurées en fonction de l'énergie du faisceau incident et de la tension appliquée aux bornes du dispositif à nanofil unique.

# Chapitre 1

## Caractérisation des propriétés de transport de nanofils cœur-coquille par mesure de caractéristiques courant-tension et spectroscopie

---

1	Dispositifs semi-conducteurs à base de jonction p-n.....	13
1.1	Jonction p-n à l'équilibre .....	13
1.2	Jonction p-n et LED hors équilibre.....	17
1.2.1	Modèle de Shockley .....	17
1.2.2	Présence de puits quantiques au sein de la ZCE (structure de type LED) .....	20
1.2.3	Recombinaison Shockley-Read-Hall dans la ZCE .....	23
1.2.4	Courant tunnel assisté par les défauts .....	27
1.2.4.1	Polarisation directe ( $U>0$ ).....	28
1.2.4.2	Polarisation inverse ( $U<0$ ) .....	28
1.3	Influence des contacts sur la caractéristique courant-tension .....	30
2	Croissance et structure des échantillons.....	32
2.1	Hétérostructure à puits quantiques .....	32
2.2	Hétérostructure à segment radial large .....	34
3	Caractérisation optique des nanofils.....	35
3.1	Hétérostructure à puits quantiques .....	35
3.1.1	Cathodoluminescence (CL) .....	35
3.1.2	Micro-photoluminescence ( $\mu$ PL) .....	41
3.2	Hétérostructure à segment large .....	42
4	Fabrication des dispositifs à nanofil unique.....	43
5	Caractérisation électrique .....	44
5.1	Hétérostructure à segment large .....	44
5.1.1	Courant de fuite en inverse .....	45
5.1.2	Courant en polarisation directe .....	52
5.2	Hétérostructure à puits quantiques .....	61
5.2.1	Mesures à température ambiante en fonction de la tension appliquée .....	61
5.2.2	Comportement de l'EL en fonction de la température .....	63
5.2.3	Modèle fondé sur l'inhomogénéité d'injection dans les puits quantiques.....	64
5.2.4	Modèle fondé sur le transport des porteurs de charges dans les puits quantiques. 72	
5.2.4.1	Equations du transport de charges dans une hétérostructure et conditions d'existence d'un courant dans les puits quantiques .....	74



5.2.4.2	Détermination de la concentration des porteurs injectés ponctuellement dans les puits en présence d'un champ effectif en régime de faible injection.....	77
5.2.4.3	Transport des porteurs de charges dans les puits en régime de forte injection..	80
6	Conclusion .....	82
Annexe I-A Modèle déterminant l'expression du courant de fuite par effet tunnel assisté par des défauts dans une jonction p-n polarisée en inverse .....		83
Annexe I-B Dérivation analytique de la densité des porteurs injectés ponctuellement dans les puits en présence d'un champ effectif en régime de faible injection.....		87

Dans ce chapitre, j'ai choisi de me concentrer sur l'étude de deux types d'hétérostructures que j'ai caractérisées au cours de ma thèse. La première hétérostructure est une hétérostructure à segment large d'InGaN. J'utiliserai l'étude de cet échantillon pour illustrer l'analyse des courbes courant-tension de dispositifs à nanofil unique, avec comme objectif d'identifier les mécanismes de conduction dominants et les effets liés à la répartition non homogène du courant dans le nanofil. La seconde structure à laquelle je vais m'intéresser est une hétérostructure à puits quantiques qui présente la particularité d'être localisée à la fois sur les facettes radiales et axiale du nanofil. A partir de sa caractérisation par spectroscopie d'électroluminescence de nanofil, je chercherai à mettre en évidence et modéliser la façon dont le courant se distribue dans cette structure. Les résultats de cette deuxième partie sont issus en partie d'un travail commun réalisé avec les anciens doctorants de l'équipe, Gwénolé Jacopin et Andres de Luna Bugallo.

Le chapitre est divisé en six sections. La première est dédiée à des rappels sur les caractéristiques des jonctions p-n à l'équilibre et hors-équilibre. La deuxième présente la croissance des échantillons. Elle est suivie par une partie dédiée à la caractérisation optique des nanofils. La quatrième section présente brièvement le procédé de fabrication utilisé pour réaliser des dispositifs à nanofils uniques. La cinquième section qui représente le cœur du chapitre est consacrée à la caractérisation électrique des dispositifs.

## 1 Dispositifs semi-conducteurs à base de jonction p-n

Les structures de type Diode Electroluminescente sont constituées d'une jonction p-n au sein de laquelle sont incorporés des puits quantiques. Dans un premier temps, je rappelle les caractéristiques essentielles des jonctions p-n à l'équilibre, ces dernières étant peu différentes dans le cas des structures de type LEDs. Je présente ensuite le formalisme habituellement utilisé pour comprendre le comportement d'une jonction p-n hors équilibre et j'applique ce formalisme au cas de la structure de type LEDs. Enfin, je discuterai de l'influence des défauts électroniques profonds sur les caractéristiques courant-tension des dispositifs.

### 1.1 Jonction p-n à l'équilibre

Une jonction p-n est un dispositif semi-conducteur ambipolaire constitué de deux régions, l'une avec un dopage de type n l'autre avec un dopage de type p. On définit un axe  $x$  orienté de façon à ce que la partie située en  $x < 0$  soit dopée de type n avec une densité de donneur  $N_D$  tandis que la partie située en  $x > 0$  est dopée de type p avec une densité d'accepteur  $N_A$ . On a fait ici implicitement l'hypothèse que la jonction est abrupte, c'est-à-dire que la densité de donneur (resp. accepteur) chute brutalement en  $x = 0$ . Cela suppose notamment que lors de la croissance de l'échantillon la diffusion des dopants se fait sur une distance négligeable devant la largeur de la zone de charge d'espace de la jonction.

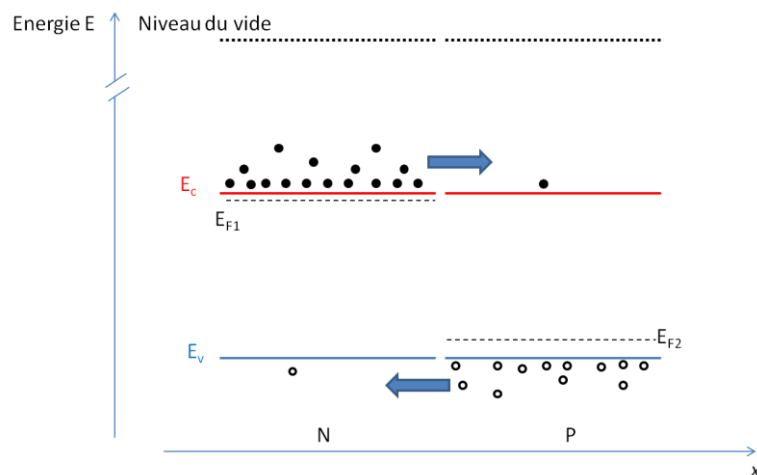
L'approche souvent adoptée pour déterminer la structure de bande de la jonction p-n à l'équilibre consiste à faire l'expérience de pensée illustrée dans la Figure 2. Les parties dopées n et p sont initialement séparées spatialement par du vide. Dans la partie dopée n, le niveau de Fermi, qui représente le potentiel chimique du matériau, a une valeur  $E_{F1}$  proche de l'énergie du bas de la bande de conduction  $E_c$  alors que dans la partie dopée p, il a une valeur  $E_{F2}$  proche de l'énergie du haut de la bande de valence  $E_v$ . Imaginons maintenant que l'on rapproche les deux parties jusqu'à

les mettre en contact. Au niveau de l'interface p/n, il y a une variation importante de la densité d'électrons  $n(x)$  et de trous  $p(x)$ . D'après la loi de Fick, les électrons et les trous vont diffuser à travers l'interface puis se recombiner.

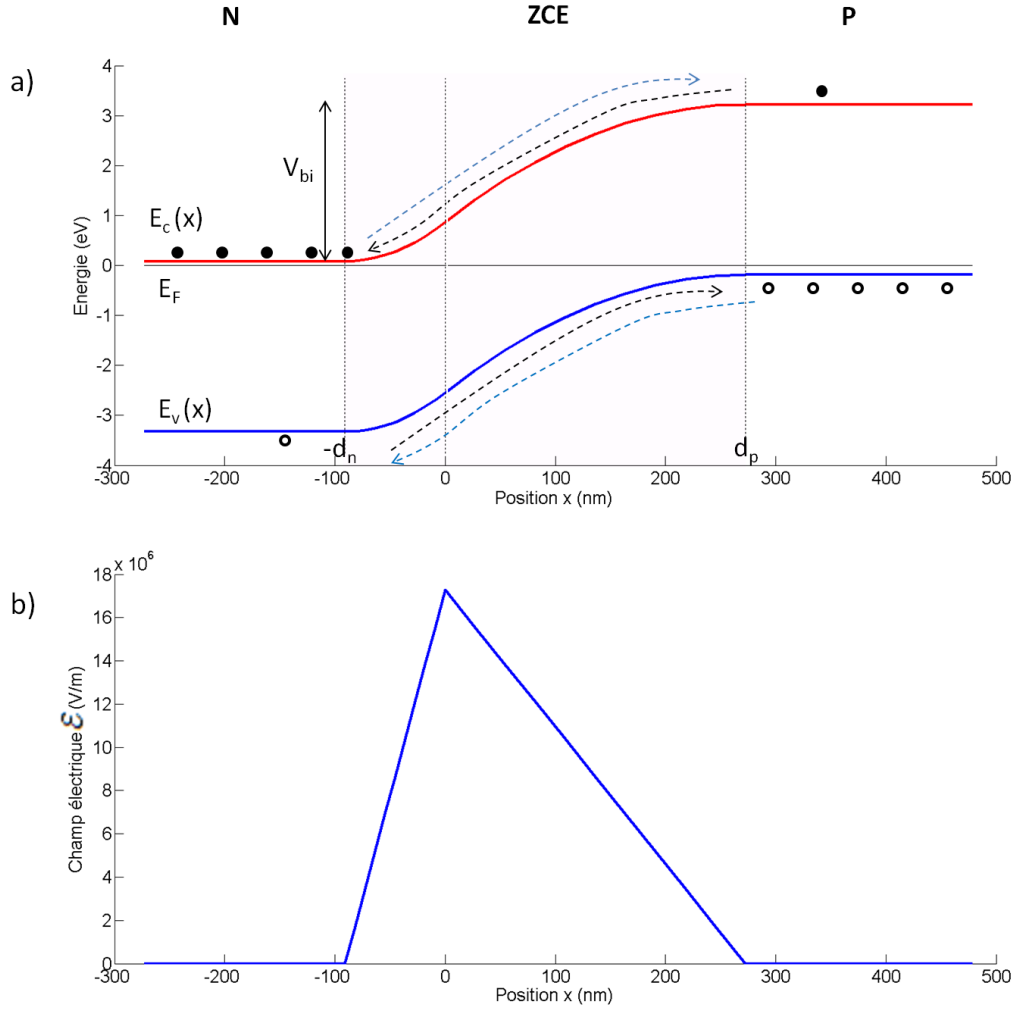
A mesure qu'elles se vident de leurs porteurs libres, les deux parties n et p se chargent. Au voisinage de l'interface, dans la région déplétée appelée Zone de Charge d'Espace (ZCE), les dopants ionisés créent un champ électrique  $\mathcal{E}$  qui engendre un courant de dérive (*drift*) qui s'oppose au courant de diffusion. A l'équilibre, le courant de dérive compense exactement le courant de diffusion. Une autre façon de formuler cela consiste à dire que le potentiel électrique  $\phi$ , dont dérive le champ  $\mathcal{E}$ , déplace localement la structure de bande électronique du semi-conducteur d'une énergie  $V = -e \phi$  où  $e$  est la charge élémentaire. Il apparaît donc une barrière de potentiel qui contrecarre le processus de diffusion. A l'équilibre, la barrière de potentiel a une valeur  $V_{bi}$  telle que le niveau de Fermi du côté n est aligné avec le niveau de Fermi du côté p. Cela traduit le fait que chaque région de la structure a la même avidité électronique que sa voisine.  $V_{bi}$  est souvent appelée « potentiel interne de la jonction » ou *build-in potential*. On a donc :

$$V_{bi} = E_{F1} - E_{F2} = E_g - k_B T \ln \left( \frac{N_v N_c}{N_A N_D} \right)$$

Eq. 1



**Figure 2** Au moment de la mise en contact des régions dopées n et p, les électrons et les trous diffusent et se recombinent de part et d'autre de la jonction. Ce processus s'arrête lorsque le potentiel électrique créé par les charges fixes (dopants ionisés) égalise l'énergie des niveaux de Fermi  $E_F$  des deux côtés de la jonction.



**Figure 3 a) Structure de bande d'une jonction p-n en GaN à l'équilibre calculée à partir des équations Eq. 2 pour des niveaux de dopage  $N_D=3 \times N_A=1.10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Le courant de diffusion (flèches bleues) et le courant de dérive (flèches noires) induit par le champ électrique  $\mathcal{E}$  se compensent exactement b) Champ électrique  $\mathcal{E}$  correspondant à la structure de bande calculée en a).**

Le terme de droite de l'équation est obtenu en supposant que l'intégralité des dopants est ionisée et que la distribution statistique de Fermi Dirac des porteurs de charges peut être approximée par la celle de Boltzmann (semi-conducteur non dégénéré). Les niveaux Fermi  $E_{F1}$  et  $E_{F2}$  peuvent alors être calculés à partir des relations  $N_D \approx N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_{F1}}{k_B T}\right)$  et  $N_A \approx N_v \exp\left(-\frac{E_{F2} - E_v}{k_B T}\right)$ .  $N_c$  et  $N_v$  représentent les densités d'état effectives de la bande de conduction et de la bande de valence respectivement. On a par ailleurs utilisé la relation  $E_c - E_v = E_g$  où  $E_g$  est l'énergie de bande interdite du semi-conducteur.  $k_B$  est la constante de Boltzmann et  $T$  est la température.

Une approximation du potentiel électrique peut être calculée de façon simple en faisant l'hypothèse qu'aucune charge libre n'est présente dans la ZCE (hypothèse de la zone désertée). En résolvant l'équation de Poisson, on obtient une dépendance parabolique du potentiel par rapport à la position  $x$  au sein de la ZCE:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < -d_n \\ \frac{e^2}{2\varepsilon} N_D (x + d_n)^2 & \text{pour } -d_n < x < 0 \\ V_{bi} - \frac{e^2}{2\varepsilon} N_A (x - d_p)^2 & \text{pour } 0 < x < d_p \\ V_{bi} & \text{pour } x > d_p \end{cases}$$

**Eq. 2**

$\varepsilon$  est la permittivité diélectrique statique du semi-conducteur.  $d_n$  et  $d_p$  correspondent à l'extension de la ZCE du côté n et p respectivement.  $d_n$  est donné par l'équation suivante :

$$d_n = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{e^2} \frac{V_{bi}}{N_D} \frac{1}{1 + \frac{N_D}{N_A}}}$$

**Eq. 3**

Cette équation est valable pour  $d_p$  en intervertissant  $N_A$  et  $N_D$ . On remarque que la largeur de la ZCE ( $d_{ZCE} = d_n + d_p$ ) est d'autant plus importante que le niveau de dopage est faible. De même, à dopage et densités effectives d'états constants, la ZCE s'élargit lorsque l'on considère des semi-conducteurs à plus grande énergie de bande interdite étant donné la relation entre  $V_{bi}$  et  $E_g$  indiquée par l'équation Eq. 1. Un exemple de structure de bande dans une jonction p-n en GaN calculée à partir des équations Eq. 2 est présenté dans la Figure 3a. Les densités de donneurs et d'accepteur ont été fixées à  $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  et  $3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . L'origine des énergies correspond au niveau de Fermi de la structure. La position  $x=0$  correspond par ailleurs à l'interface entre les parties dopées n et p. Le champ électrique  $\mathcal{E}$  dans la jonction est présenté dans la Figure 3b. Il se déduit par dérivation de l'équation Eq. 2. On notera que la valeur maximale du champ est obtenue en  $x = 0$  et vaut :

$$\mathcal{E}_{max} = \sqrt{\frac{2e^2}{\varepsilon} \frac{N_D N_A}{N_D + N_A} V_{bi}}$$

**Eq. 4**

Pour la suite, il est utile de remarquer que la densité d'électrons peut s'écrire:

$$n(x) = n_{n0} \exp\left(-\frac{V(x)}{k_B T}\right)$$

**Eq. 5**

où  $n_{n0} = N_c \exp\left(-\frac{E_c(-d_n) - E_F}{k_B T}\right) = N_D$  est la densité d'électrons du côté dopé n.

Si l'on note  $n_{p0}$  la densité d'électrons dans la région neutre dopée p ( $x \geq d_p$ ), cette grandeur est alors égale à  $\frac{n_i^2}{N_A}$  où  $n_i$  est la densité de porteur intrinsèque du semi-conducteur. La relation Eq. 5 permet de plus d'écrire :

$$n_{p0} = n_{n0} \exp\left(-\frac{V_{bi}}{k_B T}\right)$$

Eq. 6

De même, en notant  $p_{p0} = N_A$  la densité de trous du côté p et  $p_{n0} \equiv \frac{n_i^2}{N_D}$  la densité de trous du côté n, on peut écrire les équations suivantes :

$$p(x) = p_{p0} \exp\left(-\frac{V_{bi} - V(x)}{k_B T}\right)$$

Eq. 7

et

$$p_{n0} = p_{p0} \exp\left(-\frac{V_{bi}}{k_B T}\right)$$

Eq. 8

## 1.2 Jonction p-n et LED hors équilibre

### 1.2.1 Modèle de Shockley

Supposons désormais que l'on applique une tension  $U$  entre deux contacts, l'un placé sur la partie dopée n à une distance  $W_n$  de la jonction, l'autre placé sur la partie dopée p à une distance  $W_p$  de la jonction. La convention de signe pour la tension  $U$  est choisie de sorte que  $U = \phi_p - \phi_n$  où  $\phi_p$  et  $\phi_n$  sont les potentiels appliqués sur les contacts p et n respectivement. En pratique, le contact n est connecté à la masse ( $\phi_n = 0$  et  $\phi_p = U$ ). Ainsi, lorsqu'une tension positive est appliquée, la jonction p-n est polarisée en direct et le courant est positif, ce qui correspond à l'injection de porteurs dans la jonction.

Le premier traitement théorique de la jonction p-n permettant de déterminer la relation entre la tension  $U$  et le courant  $I$  est dû aux travaux de William Shockley publiés en 1949[18]. Il repose sur les remarques et hypothèses suivantes :

- La ZCE de la jonction contient très peu de porteurs libres en comparaison des régions électriquement neutres. Il s'agit donc de la section la plus résistive du dispositif. Lorsque le courant total qui traverse le dispositif est suffisamment faible, on peut alors supposer que la chute du potentiel au sein des zones électriquement neutres est négligeable et que la différence de potentiel s'applique intégralement aux bornes de la ZCE. Dans ce cas, la structure de bande hors équilibre de la jonction p-n se déduit des équations Eq. 2 et Eq. 3 en remplaçant simplement  $V_{bi}$  par  $V_{bi} - eU$ . La structure de bande présentée dans la section précédente a été recalculée pour une tension appliquée  $U = 0.5 V$  et est montrée dans la Figure 4.
- Pour calculer le courant, il est nécessaire de connaître les distributions statistiques hors-équilibre des trous et des électrons. Shockley fait l'hypothèse que la ZCE est suffisamment courte pour que les trous et les électrons dans la ZCE soient à l'équilibre avec leur réservoir respectif. Les porteurs de charges sont alors décrits par la statistique de Fermi-Dirac à l'aide d'un quasi-niveau de Fermi constant dans l'ensemble de la ZCE (il est également constant dans le

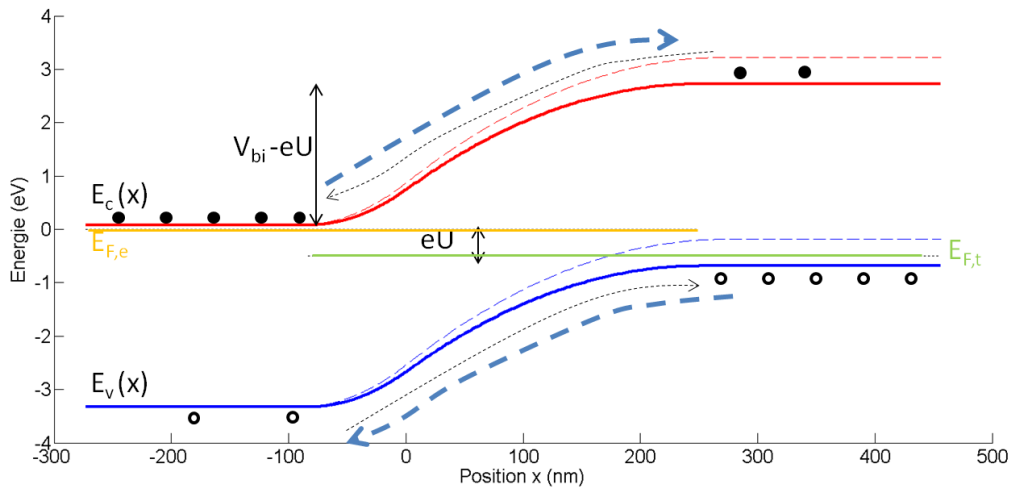
réservoir du fait de l'hypothèse i). Comme illustré dans la Figure 4, le quasi-niveau de Fermi des trous  $E_{F,t}$  est situé à une énergie  $eU$  en dessous du quasi-niveau de Fermi des électrons  $E_{F,e}$ . On en déduit qu'en présence d'une tension appliquée  $U > 0$  la densité d'électrons au bord de la ZCE dans la partie dopée p augmente par rapport à la situation à l'équilibre et s'écrit d'après les équations Eq. 5 et Eq. 6:

$$n(d_p) = n_{n0} \exp\left(-\frac{V_{bi} - eU}{k_B T}\right) = n_{p0} \exp\left(\frac{eU}{k_B T}\right)$$

Eq. 9

On remarque que tant que  $eU < V_{bi}$ , la densité d'électrons créés du côté p reste inférieure sur plusieurs ordre de grandeur à la densité  $n_{n0}$  du côté n. Lorsque  $p_{p0}$  est du même ordre de grandeur que  $n_{n0}$ , le critère  $eU < V_{bi}$  indique donc aussi que les électrons sont minoritaires vis-à-vis des trous.

Les électrons excédentaires créés au bord de la ZCE diffusent vers la droite du côté p et se recombinent avec les trous. On suppose qu'il n'y a pas de courant de dérive étant donnée l'absence de champ électrique.



**Figure 4** Comparaison entre la structure de bande à l'équilibre (en pointillé) et hors équilibre en présence d'un potentiel  $U = 0,5$  V appliqué entre le côté p et le côté n. L'hypothèse de Shockley consiste à supposer que les trous et les électrons sont à l'équilibre avec leur réservoir respectif au sein de la ZCE. On peut alors décrire leur statistique à l'aide d'un quasi-niveau de Fermi  $E_{f,t}$  et  $E_{f,e}$ .

En régime stationnaire, l'équation qui régit le transport des électrons dans la partie neutre de la région dopée p s'écrit donc, avec  $\Delta n = n(x) - n_{p0}$  :

$$\frac{\partial^2 \Delta n}{\partial x^2} - \frac{\Delta n(x)}{L_n^2} = 0$$

Eq. 10

$L_n$  correspond à la longueur de diffusion des électrons du côté p. En utilisant les conditions aux limites  $\Delta n(d_p) = n_{p0} \left( \exp\left(\frac{eU}{k_B T}\right) - 1 \right)$  et  $\Delta n(W_p) = 0$  (cette dernière condition signifiant que les électrons et les trous sont à l'équilibre au niveau du contact), on obtient la solution suivante :

$$\Delta n(x) = \Delta n(d_p) \frac{\sinh\left(\frac{W_p - x}{L_n}\right)}{\sinh\left(\frac{W_p - d_p}{L_n}\right)}$$

**Eq. 11**

Dans le cas limite d'un contact situé à l'infini ( $L_n \ll W_p$ ), on retrouve la solution connue :

$$\Delta n(x) = \Delta n(d_p) \exp\left(-\frac{x - d_p}{L_n}\right)$$

**Eq. 12**

La densité de courant induit par la diffusion des électrons est égale au courant de diffusion en  $x = d_p$ , soit :

$$J_e = -eD_n \frac{\partial \Delta n}{\partial x}(x = d_p) = J_{sat,e} \left( \exp\left(\frac{eU}{k_B T}\right) - 1 \right)$$

**Eq. 13**

où  $D_n$  est le coefficient de diffusion des électrons et  $J_{sat,e} = \frac{eD_n n_{p0}}{L_n} \coth\left(\frac{W_p - d_p}{L_n}\right)$ .

Le même raisonnement s'applique pour les trous injectés dans la région dopée n. Une équation similaire à l'équation Eq. 13 est obtenue, à la différence que  $J_{sat,e}$  est remplacé par  $J_{sat,t} = \frac{eD_p p_{n0}}{L_p} \coth\left(\frac{W_n - d_n}{L_p}\right)$ .

En l'absence de recombinaisons au sein de la ZCE, la densité de courant totale  $J$  traversant la structure est la somme de  $J_e$  et  $J_t$ , ce qui donne:

$$J = J_{sat,Shockley} \left( \exp\left(\frac{eU}{k_B T}\right) - 1 \right)$$

**Eq. 14**

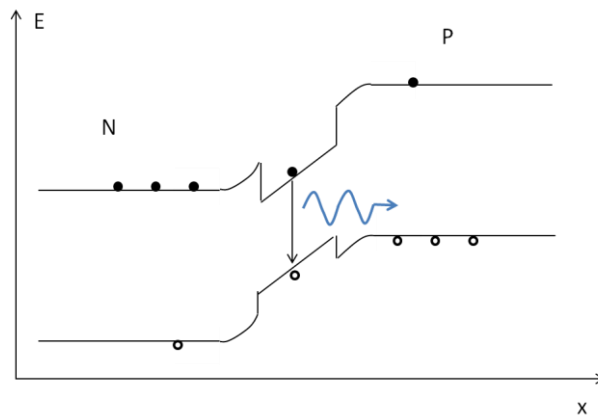
où  $J_{sat,Shockley} = J_{sat,e} + J_{sat,t}$ . On retrouve donc le comportement redresseur de la jonction p-n : la densité de courant sature à une valeur  $-J_{sat,Shockley}$  pour les tensions  $U < 0$  alors qu'elle augmente rapidement lorsque  $U > 0$ . Pour conclure sur cette partie, rappelons les conditions de validité de cette équation :

- $J(W_p/\sigma_p + W_n/\sigma_n) \ll U$  où  $\sigma_p$  et  $\sigma_n$  correspondent aux conductivités des régions dopées p et n. Cette équation indique que les chutes de potentiel sont négligeables dans les régions n et p (hypothèse de faible résistance des régions n et p).
- $d_{ZCE} \ll L_n$  et  $d_{ZCE} \ll L_p$  : la ZCE est étroite. Cela permet de négliger la recombinaison dans la ZCE (hypothèse d'absence de recombinaison dans la ZCE) et de faire l'hypothèse que les quasi-niveaux de Fermi  $y$  sont constants (hypothèse de Shockley). Le critère  $d_{ZCE} \ll L_{n-p}$  a l'avantage d'être simple et commode à utiliser ; cependant il n'est pas forcément le plus pertinent. Les longueurs de diffusion  $L_n$  et  $L_p$  sont définies dans les régions neutres. Il faudrait rigoureusement définir une grandeur équivalente valable dans la ZCE. Cette



grandeur prendrait alors en compte les conditions particulières de cette région (peu de porteurs libres, champ électrique intense) et correspondrait à un libre parcours moyen avant capture / recombinaison. D'un point de vue expérimental, ce critère est cependant difficilement applicable.

- $eU < V_{bi}$  : cette hypothèse permet de supposer que les porteurs injectés restent minoritaires (hypothèse d'injection de porteurs minoritaires)
- $J/\sigma_n \ll \frac{k_B T}{eL_p}$  et  $J/\sigma_p \ll \frac{k_B T}{eL_n}$  : ces équations expriment les conditions de validité de l'hypothèse selon laquelle le courant de dérive des porteurs minoritaires est négligeable dans les régions neutres devant le courant de diffusion. Dans le cas des trous ayant une mobilité  $\mu_p$ , elle s'obtient en écrivant  $ep_n\mu_p\mathcal{E} \ll eD_pp_n/L_p$ . On utilise ensuite la relation d'Einstein  $\frac{D_p}{\mu_p} = \frac{k_B T}{e}$  ainsi que l'estimation du champ électrique dans les régions neutres  $\mathcal{E} \sim J/\sigma_n$  [19] (hypothèse du régime de diffusion).



**Figure 5 Hétérojonction p-n : le matériau central de la jonction possède une énergie de bande interdite inférieure afin de limiter la réabsorption des photons**

### 1.2.2 Présence de puits quantiques au sein de la ZCE (structure de type LED)

L'homojonction p-n est peu adaptée à la réalisation des LEDs. Les performances sont en effet dans ce cas limitées par l'absorption des photons émis. On utilise donc généralement une double hétérostructure en insérant au centre de la jonction un semi-conducteur de plus faible énergie de bande interdite, comme illustré dans la Figure 5. La réabsorption des photons est alors limitée au volume du matériau central. Lorsque l'on diminue l'épaisseur de ce matériau en dessous de la longueur d'onde de De Broglie des porteurs de charges, on obtient des puits quantiques. Les structures à puits quantiques offrent de meilleures performances que les hétérojonctions larges. Elles permettent en effet de diminuer la réabsorption des photons. De plus, à densité de courant égale, le confinement des puits quantiques conduit à une plus forte densité de porteurs et donc à une durée de vie des porteurs plus faible.

Cependant, une des difficultés avec les doubles hétérostructures et en particulier avec les structures à puits quantiques est de s'assurer que les porteurs injectés par les côtés n et p se recombinent effectivement dans le matériau central et non dans les matériaux adjacents. Les taux de capture et de recombinaison dans les puits quantiques sont donc des paramètres cruciaux pour le rendement

LED. De nombreuses études portent sur l'optimisation de la région active afin de maximiser ces paramètres. Plusieurs stratégies ont ainsi été développées ces dernières années pour limiter le passage d'électrons au-delà de la région active en régime de forte injection dans les LEDs en InGaN/GaN. On peut citer notamment l'introduction d'une barrière bloquante pour les électrons (*Electron Blocking Layer*) placée entre la région active et la région dopée p [20]. Cette barrière possède une énergie de bande interdite plus grande que le GaN et est réalisée généralement en p-AlGaIn. Cette barrière est dopée p afin de ne pas former une barrière dans la bande de valence qui dégraderait l'injection des trous dans la région active. Il a par ailleurs été montré que des profils de bande en escalier du côté n de la jonction améliorent les performances des LEDs[21] : en abaissant l'énergie de la bande de conduction à l'aide d'une couche en n-InGaIn, on favorise l'injection d'électrons de plus faible énergie. Ces électrons ont alors une probabilité plus forte d'être capturés par les puits.

Pour le calcul de la caractéristique courant-tension des LEDs, nous supposons pour simplifier que la capture des porteurs par les puits quantiques est suffisamment efficace pour que l'on puisse négliger les recombinaisons en dehors de la ZCE. Par conséquent, l'intégralité des charges qui sont injectées dans la jonction s'y recombine : le taux de recombinaison total  $R_{tot}$  dans le volume de la jonction est donc égal au flux d'électrons  $J_e/q$ , qui est lui-même égal au flux de trous  $J_t/q$  par neutralité électrique.  $R_{tot}$  prend en compte les différents mécanismes possibles de recombinaison radiative et non radiative. Lorsque les densités de trous et d'électrons hors équilibre sont semblables (i.e.  $n \sim p$ ), la recombinaison non radiative assistée par les défauts (recombinaison de type Shockley-Read-Hall) s'écrit  $A_{SRH}n$  où  $A_{SRH}$  est une constante qui dépend de la densité de défauts et de leur efficacité de capture. La recombinaison radiative des paires électrons-trous libres est de la forme  $Bn^2$  où  $B$  est le coefficient de recombinaison bimoléculaire. On notera que lorsque ces paires forment des excitons (i.e. lorsque la densité de porteurs ne dépasse pas la densité de Mott), le taux de recombinaison est alors proportionnel à la concentration d'excitons soit  $A_{exc}n$ . Nous nous placerons dans le cas où les paires électrons-trous sont majoritairement libres. Un autre mécanisme de recombinaison qui peut avoir de l'importance est la recombinaison Auger qui s'écrit  $C_{Aug}n^3$ . Nous avons donc :

$$\frac{J_e}{qd} = \frac{J_t}{qd} = \frac{J}{qd} \sim A_{SRH}n + Bn^2 + C_{Aug}n^3$$

Eq. 15

Pour de faibles densités de porteurs, les recombinaisons SRH sont généralement prépondérantes. En raison de sa dépendance en  $n^2$ , le taux de recombinaison radiatif devient cependant dominant lorsque la densité de porteurs augmente. Le terme Auger ne joue un rôle que pour de très fortes densités de porteurs. C'est d'ailleurs ce mécanisme qui a été identifié comme une des principales causes de la chute d'efficacité (*efficiency droop*) des LEDs en InGaIn sous forte injection [22]. Dans la suite, nous nous placerons dans le cas où le terme de recombinaison radiative est dominant. Nous négligeons donc les recombinaisons par effet Auger. Les recombinaisons SRH seront par ailleurs traitées dans la section suivante. Le taux de recombinaison radiatif s'écrit rigoureusement  $B(np - n_0p_0)$  où  $n_0$  et  $p_0$  sont les densités d'électrons et de trous à l'équilibre dans les puits quantiques. Nous avons donc :

$$J = q \int_{\text{région active}} dx B (n(x)p(x) - n_0(x)p_0(x))$$

**Eq. 16**

$n$  et  $p$  sont donnés par les relations  $n(x) = N_c \exp\left(-\frac{E_c(x) - E_{F,e}}{k_B T}\right)$  et  $p(x) = N_v \exp\left(-\frac{E_{F,t} - E_v(x)}{k_B T}\right)$ .

Sachant que  $N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right) = n_i^2$ , on obtient :

$$n(x)p(x) = n_i^2 \exp\left(\frac{E_{F,e} - E_{F,t}}{k_B T}\right)$$

**Eq. 17**

En supposant que l'hypothèse de Shockley est vérifiée dans la région active, i.e.  $E_{F,e} - E_{F,t} = eU$ , on obtient alors :

$$J = e B n_i^2 d_{PQ} \left( \exp\left(\frac{eU}{k_B T}\right) - 1 \right)$$

**Eq. 18**

$d_{PQ}$  représente ici la largeur effective de la région active i.e. la largeur cumulée des puits quantiques. On obtient donc une formule similaire au modèle de Shockley (équation Eq. 14), le courant de saturation valant cette fois  $J_{sat,LED} = e B n_i^2 d_{PQ}$ . Sachant que  $B = \frac{1}{\tau_R} \frac{N_j}{N_c N_v}$  où  $N_j$  est la densité d'états joints et  $\tau_R$  la durée de vie radiative [23], on peut alors écrire :

$$J_{sat,LED} = e \frac{N_j}{\tau_R} \exp\left(-\frac{E_{g,PQ}}{k_B T}\right) d_{PQ}$$

**Eq. 19**

La densité effective d'états joints dans un puits quantique est donnée par l'équation suivante, lorsque l'on ne considère que le premier niveau confiné,

$$N_j = \frac{m_r}{\pi \hbar^2} k_B T$$

**Eq. 20**

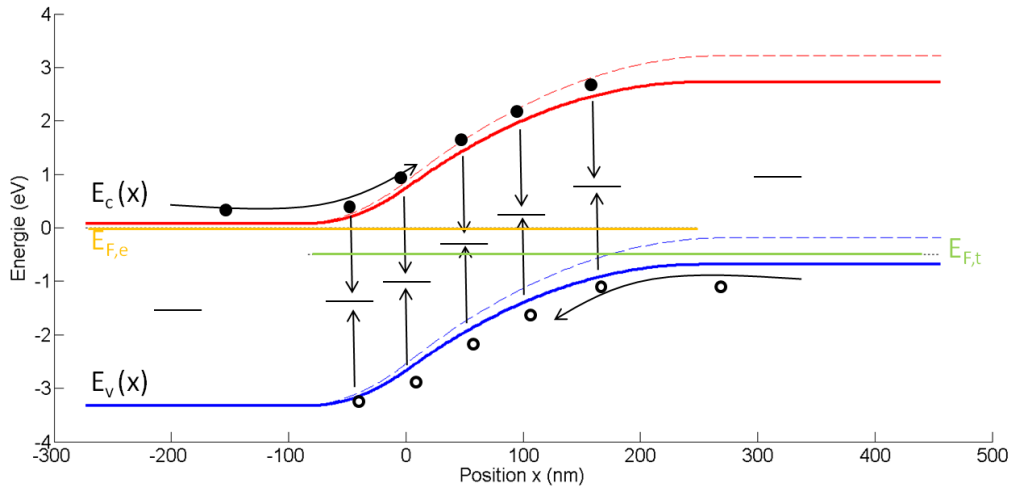
où  $m_r$  est la masse réduite donnée par  $\frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_v}$  avec  $m_c$  et  $m_v$  les masses effectives des bandes de conduction et de trous. On remarque que la densité d'états joints dépend linéairement de la température, et non en  $T^{\frac{3}{2}}$  comme c'est le cas en l'absence de confinement (cas 3D). La durée de vie radiative dépend de l'indice optique  $n_{op}$  du semi-conducteur, de son énergie de bande interdite  $E_{g,PQ}$  et de son énergie de Kane  $E_P$  [23]:

$$\frac{1}{\tau_R} = \frac{e^2 n_{op} E_{g,PQ} E_P}{2 \pi c^3 \hbar^2 \epsilon_0 m_0}$$

**Eq. 21**

$m_0$  représente ici la masse d'un électron libre. L'énergie de Kane  $E_P$  est de l'ordre de 20 meV pour la plupart des semi-conducteurs III-V, excepté InN pour lequel elle est de l'ordre de 10 meV[24].

### 1.2.3 Recombinaison Shockley-Read-Hall dans la ZCE



**Figure 6 Mécanisme de recombinaison Shockley-Read-Hall au sein de la ZCE par l'intermédiaire de défauts électroniques profonds. Le cas illustré correspond à une tension appliquée de 0.5 V.**

Dans le cas de la jonction p-n « simple », une des conditions de validité du modèle de Shockley est que la ZCE est étroite, ce que l'on exprime par les relations  $d_{ZCE} \ll L_n$  et  $d_{ZCE} \ll L_p$ . Ces conditions ne sont pas toujours vérifiées avec des semi-conducteurs à grand gap et/ou lorsque le dopage est faible. Il faut alors considérer le processus de génération - recombinaisons assisté par les défauts au sein de la ZCE (processus de Shockley-Read-Hall (SRH)) [25]. Dans cette partie, j'analyse l'impact de la génération-recombinaison SRH sur les caractéristique courant-tension des dispositifs. Je traite d'abord le cas d'une jonction p-n simple puis étudie l'impact de la présence de puits quantiques dans la structure.

Comme illustré dans la Figure 6, la recombinaison SRH nécessite la présence d'états localisés dont les niveaux d'énergie sont localisés au sein de la bande interdite du semi-conducteur. On note  $E_T$  l'énergie de confinement de ces défauts par rapport à la bande de conduction. Ces défauts électroniques profonds peuvent être notamment créés par des impuretés. La recombinaison se fait en deux étapes : un électron est d'abord capturé par le défaut puis un trou est lui-même capturé, ce qui conduit à l'annihilation d'une paire électron-trou. Lorsque la tension  $U$  est négative, le mécanisme inverse se produit : il y a donc une génération de porteurs de charge assistée par les défauts. Le taux de génération-recombinaison des électrons et des trous est donné par [23] :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial t} = - \frac{np - n_i^2}{\tau_{n0}(p + p_1) + \tau_{p0}(n + n_1)}$$

**Eq. 22**

$\tau_{n0}$  et  $\tau_{p0}$  sont des constantes définies à partir des coefficients de capture des électrons et des trous  $c_e$  et  $c_t$ <sup>2</sup> et de la densité des défauts  $N_T$  :  $\tau_{n0} = 1/c_e N_T$  et  $\tau_{p0} = 1/c_h N_T$ . Par ailleurs,  $p_1$  et  $n_1$  sont des grandeurs homogènes à des densités et dépendent de l'énergie  $E_T$  de l'état localisé :  $p_1 =$

<sup>2</sup> Les coefficients de capture s'écrivent  $\sigma v_{th}$  où  $\sigma$  est une section efficace de capture et  $v_{th}$  est la vitesse thermique

$N_v \exp\left(-\frac{E_T - E_v}{k_B T}\right)$  et  $n_1 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_T}{k_B T}\right)$ . Pour un niveau  $E_T$  situé au milieu de la bande interdite,  $p_1$  et  $n_1$  sont donc de l'ordre de la densité de porteurs intrinsèque  $n_i = \sqrt{N_c N_v} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right)$ . La densité de courant  $J_{SRH}$  provoquée par la recombinaison au sein de la ZCE s'écrit donc en régime stationnaire :

$$J_{SRH} = e \int_{-d_n}^{d_p} \frac{n(x)p(x) - n_i^2}{\tau_{n0}(p(x) + p_1) + \tau_{p0}(n(x) + n_1)} dx$$

**Eq. 23**

En insérant l'équation Eq. 17 dans l'équation Eq. 23, on a alors:

$$J_{SRH} = e \left( \exp\left(\frac{eU}{k_B T}\right) - 1 \right) \int_{-d_n}^{d_p} \frac{n_i^2}{\tau_{n0}(p(x) + p_1) + \tau_{p0}(n(x) + n_1)} dx$$

**Eq. 24**

On peut estimer l'intégrale en majorant l'intégrande. Le minimum du dénominateur est obtenu en cherchant la position  $x_0$  à laquelle sa dérivée s'annule. En utilisant les équations Eq. 5 et Eq. 7, on aboutit alors à la condition  $\tau_{n0}p(x_0) - \tau_{p0}n(x_0) = 0$ , qui après résolution, donne :

$$J_{SRH} \approx e \left( \exp\left(\frac{eU}{k_B T}\right) - 1 \right) \int_{-d_n}^{d_p} \frac{n_i^2}{2\sqrt{\tau_{n0}\tau_{p0}}n_i \exp\left(\frac{eU}{2k_B T}\right) + \tau_{n0}p_1 + \tau_{p0}n_1} dx$$

**Eq. 25**

Lorsque  $U < 0$ , le terme exponentiel de l'intégrande devient négligeable. On obtient alors, sachant que  $d_{ZCE} = d_p + d_n$  :

$$J_{SRH}(U < 0) = -\frac{en_i^2}{\tau_{n0}p_1 + \tau_{p0}n_1} d_{ZCE}$$

**Eq. 26**

On constate donc que le courant de fuite en inverse est proportionnel à la largeur de la ZCE. D'après l'équation Eq. 3, cette dernière dépend de la tension appliquée  $U$  et varie selon  $\sqrt{V_{bi} - eU}$ . Le courant en inverse augmente donc en valeur absolue à mesure que  $U$  diminue, ce qui est différent de ce qui obtenu avec le modèle de Shockley pour lequel le courant sature à  $-J_{sat, Shockley}$ .

Par ailleurs, on remarque que  $J_{SHR}$  est proportionnel à  $n_i$  ( $p_1$  et  $n_1$  étant de l'ordre de  $n_i$ ). En revanche dans le modèle de Shockley, le courant de diffusion limite  $J_{sat, Shockley}$  est la somme de deux termes, l'un étant proportionnel à  $n_p = n_i^2/N_A$ , l'autre étant proportionnel à  $p_n = n_i^2/N_D$ . Par conséquent, le ratio  $\frac{J_{SRH}}{J_{sat, Shockley}}$  est proportionnel à  $n_i^{-1}$ . Le courant de fuite généré par les défauts joue donc un rôle d'autant plus important que l'on considère des semi-conducteurs à grande énergie de bande interdite.

Pour les tensions  $U > 0$ , on remarque que le terme exponentiel du dénominateur de l'intégrande devient dominant lorsque  $eU > k_B T$ . On obtient ainsi :

$$J_{SRH}(U > \frac{k_B T}{e}) \approx J_{sat,SRH} \exp\left(\frac{eU}{2k_B T}\right),$$

Eq. 27

avec

$$J_{sat,SRH} = e \frac{n_i d_{ZCE}}{2\sqrt{\tau_{n0}\tau_{p0}}}$$

Eq. 28

Cette formule est dans sa forme similaire à celle obtenue avec le modèle de Shockley (équation Eq. 14). La différence la plus notable est que le dénominateur dans l'exponentielle vaut  $2k_B T$  alors qu'il ne vaut que  $k_B T$  dans le modèle de Shockley. Les équations décrivant la recombinaison SRH sont résumées dans la Figure 7.

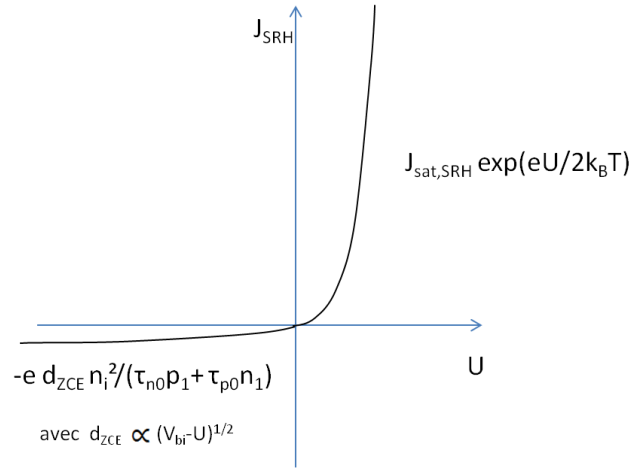


Figure 7 Caractéristique courant-tension attendue en présence de recombinaison SRH

Dans le cas des diodes réelles, le courant peut provenir aussi bien des recombinaisons SRH que de la diffusion des porteurs minoritaires dans les régions neutres. Il est alors commode d'interpréter les résultats expérimentaux en utilisant une équation semblable à celles obtenue par le modèle de Shockley que l'on corrige en introduisant un paramètre d'idéalité  $\eta$  compris entre 1 (cas où la diffusion en dehors de la ZCE est dominante) et 2 (cas où les recombinaison SRH sont dominantes) :

$$J_{diode\ réelle} \approx J_{sat} \left( \exp\left(\frac{eU}{\eta k_B T}\right) - 1 \right)$$

Eq. 29

L'équation Eq. 29 peut laisser penser que le coefficient d'idéalité  $\eta$  est une constante. La valeur de ce paramètre dépend cependant de la gamme de tension que l'on considère : pour des faibles valeurs de  $U$ , les recombinaisons SRH peuvent jouer un rôle significatif, conduisant à une valeur de  $\eta$  proche de 2. En revanche, lorsque  $U$  augmente les autres contributions telle que le courant de diffusion ou la recombinaison radiative dans les puits quantiques dans les structures de type LED deviennent dominantes en raison de leur dépendance en  $\exp\left(\frac{eU}{k_B T}\right)$  et non  $\exp\left(\frac{eU}{2k_B T}\right)$ . Le facteur d'idéalité  $\eta$  se rapproche alors théoriquement de 1. Un autre effet qui conduit à la diminution de la contribution

SRH à forte tension provient du fait que  $J_{sat,SRH}$  est proportionnel à  $d_{ZCE}$ , la largeur de la ZCE. Or, lorsque  $U$  augmente, cette dernière diminue et tend vers 0. Le courant  $J_{SRH}$  tend donc également vers 0. Cela ne signifie pas pour autant que les recombinaisons SRH ne se produisent plus : ces dernières sont par exemple prises en compte dans le modèle de Shockley par le truchement des longueurs de diffusion des porteurs minoritaires  $L_n$  et  $L_p$  qui sont en effet égales à  $\sqrt{D_n\tau_e}$  et  $\sqrt{D_p\tau_t}$  où  $D_n$  et  $D_p$  représentent les coefficients de diffusion des électrons et des trous et  $\tau_e$  et  $\tau_t$  leur durée de vie en tant que porteurs minoritaires. La durée de vie prend en compte tous les mécanismes de recombinaison possibles, dont notamment les recombinaisons SRH.

Que se passe-t-il désormais lorsque l'on considère une structure de type LED qui contient au sein de la ZCE des puits quantiques ? Toute la démarche présentée pour aboutir à l'équation Eq. 27 reste valable ; les différences concernent le matériau et le domaine d'intégration que l'on choisit désormais à la région des puits quantiques (on calcule ici spécifiquement la contribution des puits). L'équation Eq. 27 s'applique donc en remplaçant  $J_{sat,SRH}$  par :

$$J_{sat,SRH-PQ} = e \frac{n_{i-PQ} d_{PQ}}{2\sqrt{\tau_{n0}'\tau_{p0}'}}$$

**Eq. 30**

Contrairement à ce qui a été obtenu précédemment, on remarque que  $J_{sat,SRH-PQ}$  ne dépend pas de la tension  $U$ , le terme  $d_{ZCE}$  qui dépend de la tension ayant été remplacé par  $d_{PQ}$ . Il est intéressant de comparer le poids relatif de la contribution liée aux puits quantiques et celle liée au reste de la jonction. Si l'on suppose que la section efficace des défauts et leur densité sont similaires dans le puits et dans le reste de la jonction, on a alors  $\tau_{n0}' \approx \tau_{n0}$  et  $\tau_{p0}' \approx \tau_{p0}$ . Le rapport  $J_{sat,SRH-PQ}/J_{sat,SRH}$  s'écrit donc :

$$\frac{J_{sat,SRH-PQ}}{J_{sat,SRH}} \sim \frac{d_{PQ}}{d_{ZCE}} \frac{n_{i-PQ}}{n_i} = \frac{d_{PQ}}{d_{ZCE}} \frac{(N_c N_v)_{PQ}}{N_c N_v} \exp\left(\frac{E_g - E_{g-PQ}}{2k_B T}\right)$$

**Eq. 31**

Dans le cas des LED en nitrure, les densités effectives d'états  $N_c$  et  $N_v$  sont du même ordre de grandeur pour le GaN et l'InGaN. Les énergies de bande interdite varient en revanche fortement en fonction de la composition d'indium. Le rapport  $\frac{J_{sat,SRH-PQ}}{J_{sat,SRH}}$  est donc principalement déterminé par le terme exponentiel. A titre d'exemple, il a été calculé pour une hétérojonction contenant 5 puits quantiques de 1.3 nm de large. On suppose que la ZCE s'étend sur 275 nm (cas similaire à certains fils étudiés au cours de ma thèse). Le calcul a été fait pour deux taux d'indium dans les puits, de 0.1 et 0.2. Les densités effectives d'états pour l'InGaN ont été estimées en supposant une dépendance linéaire avec la composition, en utilisant les valeurs de la référence [26] pour le GaN et l'InN. L'énergie de bande interdite de l'InGaN a été calculée à l'aide de la référence [27]. Les résultats sont présentés dans le

Tableau 1. On constate que le courant induit par les recombinaisons SRH dans les puits est de plusieurs ordres de grandeurs supérieur à celui induit en dehors des puits.

**Tableau 1 Comparaison entre les courants de fuites induits par les puits et par la ZCE dans une hétérojonction InGaN / GaN à 5 puits quantiques.**

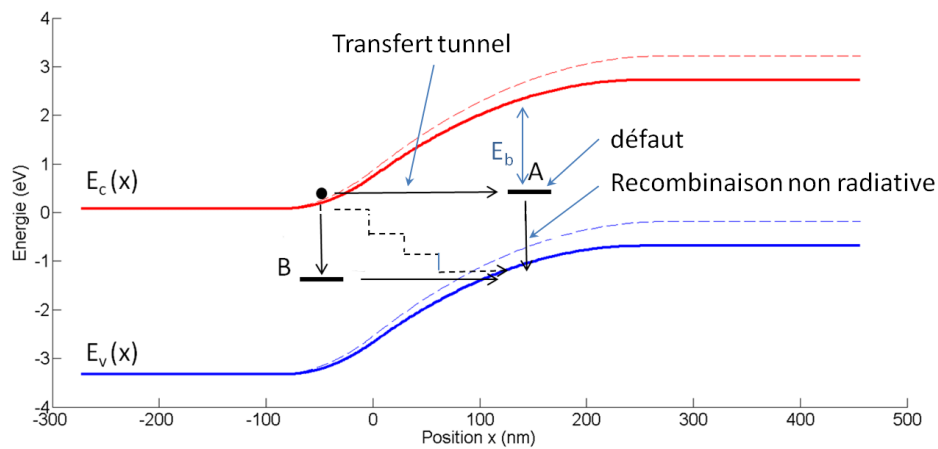
Structure	$d_{PQ}$ (nm)	$d_{ZCE}$ (nm)	$x_{In}$	$E_g - E_{g-PQ}$ (eV)	$J_{sat,SRH-PQ}/J_{sat,SRH}$
5 PQ d'InGaN / GaN	$1.3 \times 5$	275	0.1	0.51	$6.6 \times 10^2$
5 PQ d'InGaN / GaN	$1.3 \times 5$	275	0.2	0.97	$6.1 \times 10^6$

Pour ce qui est du courant de fuite en inverse, une augmentation du courant est également attendue en présence des puits (cf. Eq. 26). Cependant, cet effet est modulé par la probabilité d'échappement des paires créées dans le puits. L'échappement thermoionique a une dépendance en  $\exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)$  où  $E$  est la hauteur de barrière qui compense la dépendance en  $\exp\left(\frac{E_g}{kT}\right)$  de  $J_{sat-SRH}$ . L'augmentation du courant de fuite liée à la présence des puits est donc significative lorsque les porteurs ont une probabilité non négligeable de traverser les barrières par effet tunnel, ce qui se produit lorsque la jonction est suffisamment polarisée en inverse[28].

Pour résumer, on retiendra de ce paragraphe les points suivants :

- Le mécanisme de génération-recombinaison SRH crée des courants de fuite pour des tensions  $U < 0$ . Le courant de fuite est proportionnel à la largeur de la ZCE qui varie en fonction de  $U$  comme  $\sqrt{V_{bi} - eU}$ .
- En polarisation directe ( $U > 0$ ), le courant induit par les recombinaisons SRH dans l'ensemble de la jonction ou uniquement dans les puits quantiques a une dépendance en fonction de la tension en  $\exp\left(\frac{eU}{2k_B T}\right)$ .
- Le courant de fuite induit par les puits quantiques peut être plusieurs ordres de grandeurs supérieur à celui induit par le reste de la jonction
- En inverse, les puits quantiques contribuent de façon significative au courant de fuite lorsque les porteurs peuvent s'en échapper par effet tunnel.

#### 1.2.4 Courant tunnel assisté par les défauts



**Figure 8 Diagramme illustrant les mécanismes de transport tunnel assisté par les défauts**



### 1.2.4.1 Polarisation directe ( $U > 0$ )

Une autre source de courant possible au sein de la jonction est le courant par effet tunnel assisté par les défauts au sein de la ZCE. Ce mécanisme, schématisé dans la Figure 8, peut impliquer un ou plusieurs états localisés dans la bande interdite. Il a été historiquement suggéré par Esaki pour expliquer l'excès de courant observé dans les diodes à effet tunnel [29]. En 1965, Dumin et Pearson ont proposé également ce mécanisme pour expliquer les caractéristiques courant-tension observées pour des tensions modérées et à basse température dans des jonctions p-n en GaAs [30]. En supposant que la probabilité de transmission tunnel est le terme dominant dans l'expression du courant en fonction de la tension appliquée, ils aboutissent à la formule suivante [30] :

$$J_{tunnel} = J_T \exp\left(-\frac{\pi m^{*2} E_b^{\frac{3}{2}}}{2\sqrt{2} e \hbar \epsilon}\right)$$

Eq. 32

$m^*$  est la masse effective tunnel des porteurs de charges, qui est égale à la masse réduite des électrons et des trous lors d'un transport tunnel interbande ou à la masse d'un des types de porteurs lors d'une transition impliquant un défaut profond [31].  $E_b$  est l'énergie de la barrière à franchir par effet tunnel. Celle-ci est représentée dans la Figure 8 dans le cas d'un transfert tunnel vers le défaut noté A. Dans le cas d'une jonction abrupte n<sup>+</sup>p, le champ électrique  $\mathcal{E}$  est connu de façon analytique. Cette équation se simplifie et peut se réécrire sous la forme suivante [30]:

$$J_{tunnel} = B \left( \exp\left(\frac{eU}{E_T}\right) - 1 \right), \quad U > 0$$

Eq. 33

où  $B = J_T \exp\left(-\frac{\pi m^{*2} V_{bi}^{\frac{3}{2}} \epsilon^{\frac{1}{2}}}{4 \hbar N_A^{\frac{1}{2}}}\right)$ . La grandeur  $E_T$  est une énergie caractéristique indépendante de  $U$  qui vaut approximativement :

$$E_T \approx 8e\hbar \sqrt{\frac{N_A}{m^* \epsilon}}$$

Eq. 34

Avec  $\epsilon$  la permittivité du matériau (à ne pas confondre avec le champ électrique noté  $\mathcal{E}$ ). L'équation Eq. 33 indique que le courant tunnel dépend exponentiellement de la tension appliquée. Cependant, contrairement aux recombinaisons radiatives et SRH, on remarque que le facteur associé à  $U$  dans l'exponentielle ne dépend pas de la température.

### 1.2.4.2 Polarisation inverse ( $U < 0$ )

Le transport tunnel peut également jouer un rôle lorsque l'on polarise en inverse la jonction : lors d'un transport direct de la bande de valence vers la bande de conduction, ce mécanisme correspond à celui utilisé dans les diodes Zener. En l'absence de mécanisme d'absorption / dissipation d'énergie (phonon, photon), le transport tunnel ne peut s'établir qu'à partir du moment où des états de la bande de valence du côté p sont alignés en énergie avec des états de la bande de conduction du

côté n. Cela suppose donc que la tension appliquée soit en valeur absolue supérieure à  $\frac{E_g}{e} - V_{bi}$ . La relation courant-tension dans le cas de transport tunnel dans des semi-conducteurs à gap direct est alors de la forme suivante [32]:

$$J = A U \exp\left(-\frac{b}{(V_{bi} - U)^{\frac{1}{2}}}\right), \quad U < V_{bi} - \frac{E_g}{e} (< 0)$$

**Eq. 35**

$A$  et  $b$  sont des constantes qui dépendent de la structure considérée. Riben et Feucht les ont dérivées dans le cas du GaAs qui possède une structure cristalline cubique de type « diamant ». En procédant de la même façon pour le GaN (structure wurtzite), on aboutit aux équations suivantes [32] :

$$A = \frac{8e^2}{hac}$$

$$b = \frac{4}{3\hbar} \left( \frac{m^* \varepsilon E_g^3}{N_A e^3} \right)^{\frac{1}{2}}$$

**Eq. 36**

$a$  et  $c$  sont les paramètres de maille de la structure wurtzite et  $m^*$  la masse effective réduite des porteurs de charge. En prenant  $N_A = 6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  (valeur du dopage p dans les fils que j'ai étudié), on obtient alors :

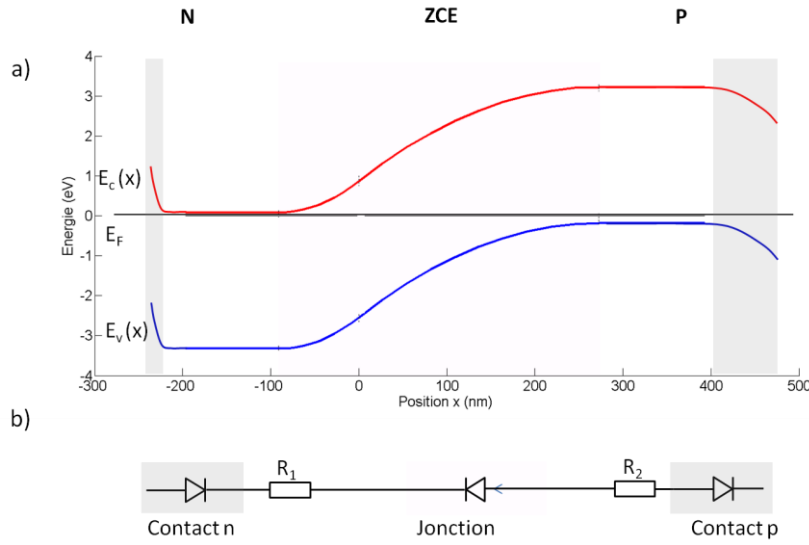
$$A = 3,4 \times 10^{-36} \text{ AV}^{-1} \text{ m}^{-2}$$

$$b = 3,1 \times 10^{-18} \text{ V}^{\frac{1}{2}}$$

**Eq. 37**

Un calcul rapide permet de se rendre compte que le courant tunnel entre la bande de valence et la bande de conduction dans des diodes en GaN est totalement négligeable (ce qui n'est pas étonnant étant donné que c'est un semi-conducteur à grand gap) : la densité de courant estimée par ce modèle est de l'ordre de  $10^{-10^{18}} \text{ A.cm}^{-2}$  pour une tension appliquée de -10V. Cependant, en présence de défauts qui font apparaître des états localisés dans la bande interdite, le transport tunnel peut jouer un rôle significatif. J'utiliserai une formule qui se rapproche de celle de la diode Zener pour estimer le courant dans ce cas.

### 1.3 Influence des contacts sur la caractéristique courant-tension



**Figure 9 a) Structure de bande de la jonction lors des contacts non parfaitement ohmiques. b) schéma électrique équivalent**

Lorsque l'on fabrique un dispositif de type diode électroluminescente, on cherche à obtenir des contacts ohmiques ayant la plus faible résistance possible. Il faut pour cela éviter qu'il se forme une barrière de potentiel pour les porteurs de charge majoritaires à l'interface semi-conducteur métal. Une règle intuitive consiste donc à choisir un métal dont le travail de sortie est égal à l'affinité électronique du semi-conducteur. En pratique, cette règle ne fonctionne cependant que dans de très rares cas. En effet, la périodicité du cristal étant brisée, il apparaît à l'interface métal/semi-conducteur des états électroniques localisés qui sont distribués de manière continue dans la bande interdite. Cela a pour conséquence le piégeage du niveau de Fermi (*pining*) dans la bande interdite du semi-conducteur, ce qui induit une courbure des bandes électroniques comme illustré dans la Figure 9. L'obtention d'un contact ohmique est dans ce cas possible lorsque la barrière de potentiel est suffisamment étroite pour que les porteurs de charges puissent la traverser avec une forte probabilité par effet tunnel. Il faut pour cela que le dopage soit le plus élevé possible. Dans le cas des nitrures, de très forts niveaux de dopage de type n sont aisément réalisables. Le dopage de type p est en revanche plus compliqué en raison de la forte énergie d'activation des dopants (de l'ordre de 200 meV pour les impuretés de magnésium) et les effets de compensation qui apparaissent au-delà d'une certaine concentration de dopants [33]. Les contacts (et particulièrement le contact p) ont donc généralement des caractéristiques courant-tension non linéaires. On peut les modéliser par une diode de type Schottky, qui est orientée tête-bêche par rapport à la diode représentant la jonction p-n. Lorsque l'on prend en compte l'effet tunnel et l'effet de la force image, le courant traversant la diode Schottky en fonction de la tension  $U_{Sch}$  appliquée à ses bornes est donné par l'équation suivante [34] :

$$I = I_S \left[ \exp\left(\frac{eU_{Sch}}{\eta k_B T}\right) - \exp\left(\left\{\frac{1}{\eta} - 1\right\} \frac{eU_{Sch}}{k_B T}\right) \right]$$

**Eq. 38**

où  $I_S$  et  $\eta$  sont des constantes qui dépendent peu de la tension appliquée. La grandeur adimensionnelle  $\eta$  est supérieure à 1 dans le cas général et tend vers 1 dans le cas limite où l'effet de

la force image est négligeable et où seul le courant thermo-ionique est pris en compte (on retrouve alors la formule plus connue  $I = I_s \left[ \exp\left(\frac{eU}{k_B T}\right) - 1 \right]$ ). D'après l'équation Eq. 38, lorsque la diode Schottky est polarisée en inverse, le courant augmente en valeur absolue de façon exponentielle avec la tension appliquée  $U_{sch}$ . On a ainsi, pour  $U < 0$  :

$$I \sim -I_s \exp\left(\frac{e|U_{sch}|}{\eta' k_B T}\right)$$

**Eq. 39**

avec  $\eta' = 1 - \frac{1}{\eta}$ . Comme l'ont remarqué Shah et al. [35], en inversant cette formule et en appliquant la loi des mailles à l'ensemble des diodes en série (contacts et jonction p-n) que l'on indexe par un numéro  $i$ , on peut écrire :

$$U \cong \sum_i \frac{\eta_i k_B T}{e} \ln\left(\frac{I}{I_{s,i}}\right)$$

**Eq. 40**

$U$  est la tension appliquée à l'ensemble des diodes en série et  $I$  le courant qui les traversent. En introduisant temporairement un courant de normalisation  $I_0$  (dont la valeur est sans importance mais qui permet de garder des grandeurs adimensionnées dans le logarithme), on peut écrire  $\ln\left(\frac{I}{I_{s,i}}\right) = \ln\left(\frac{I}{I_0}\right) - \ln\left(\frac{I_{s,i}}{I_0}\right)$ . En factorisant le terme  $\ln\left(\frac{I}{I_0}\right)$ , l'équation précédente peut alors se réécrire :

$$\ln\left(\frac{I}{I_0}\right) \cong \frac{eU}{k_B T \sum_i \eta_i} + \frac{\sum_i \eta_i \ln\left(\frac{I_{s,i}}{I_0}\right)}{\sum_i \eta_i}$$

**Eq. 41**

On pose alors  $I_{sat} = \prod_i I_{s,i}^{\frac{\eta_i}{\sum_j \eta_j}}$  et en prenant l'exponentielle de l'équation précédente, on obtient<sup>3</sup> :

$$I \cong I_{sat} \exp\left(\frac{eU}{k_B T \sum_i \eta_i}\right)$$

**Eq. 42**

On remarque donc que la présence de contacts non ohmiques préserve la dépendance exponentielle de la caractéristique courant – tension. Cependant, le facteur d'idéalité est plus grand qu'attendu : il est égal à la somme des facteurs d'idéalité de toutes les diodes en série.

---

<sup>3</sup> On a utilisé le fait que  $\prod_i I_{s,i}^{\frac{\eta_i}{\sum_j \eta_j}} = I_0^{\frac{\sum_j \eta_j}{\sum_j \eta_j}} = I_0$

## 2 Croissance et structure des échantillons

Les échantillons étudiés au cours de ce chapitre proviennent l'équipe de Christophe Durand et Joël Emery du CEA de Grenoble.

L'équipe du CEA a mis au point un procédé d'épitaxie sans catalyseur sur des substrats de saphir et de silicium. Ce procédé permet d'obtenir des fils de GaN auto-assemblés, orientés suivant l'axe  $\vec{c}$  de la structure wurtzite et possédant des facettes latérales qui correspondent aux plans  $m\{1\bar{1}00\}$  non polaires de cette structure. La croissance repose sur la technique d'épitaxie en phase vapeur aux organo-métalliques (*Metal Organic Vapor Phase Epitaxy* ou MOVPE). Le triméthylgallium (TMG) et l'ammoniac ( $\text{NH}_3$ ) sont les précurseurs gazeux sources des éléments III (Ga) et V (N) respectivement. Le silane ( $\text{SiH}_4$ ) et le biscyclopentadiénylmagnésium sont utilisés comme sources des atomes de silicium et magnésium, pour le dopage n et p du GaN respectivement. Le procédé de croissance des nanofils a fait l'objet de plusieurs publications [36]–[38] et a été développé pour faire face aux limites de la méthode VLS. Cette dernière nécessite en effet d'introduire un catalyseur, généralement un métal tel que l'or, pour promouvoir la croissance unidirectionnelle. Le catalyseur a tendance à contaminer le fil et à dégrader ses propriétés optoélectroniques. L'approche utilisée par l'équipe du CEA consiste à former des germes cristallins de GaN à la surface du substrat puis à les faire croître de façon préférentielle le long de l'axe  $\vec{c}$  de la structure wurtzite. La nucléation des germes requiert au préalable un dépôt *in situ* d'une très fine couche de  $\text{SiN}_x$ . La rugosité de cette couche a un impact majeur sur la densité et la morphologie des germes. La durée de l'étape de nucléation détermine la taille moyenne des germes et donc le diamètre moyen des nanofils. Après la nucléation, les conditions du bâti sont modifiées de façon à promouvoir une croissance anisotrope du cristal de GaN le long de la direction  $\vec{c}$ . Cette cinétique est obtenue à  $1040^\circ\text{C}$  en injectant du silane et en utilisant un rapport des flux des précurseurs des éléments V et III élevé ( $\sim 15$ ). Le silane conduit à un GaN fortement dopé n ( $n^{++}\text{-GaN}$ ) : la densité de porteurs libres est ainsi estimée à  $4 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  à température ambiante [39]. Il faut noter que ce niveau de dopage est supérieur à la densité effective d'états de la bande de conduction du GaN à 300K qui, dans le cadre de la théorie de la masse effective, vaut  $N_c \sim 2.23 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Le GaN obtenu est donc dégénéré.

Après un temps de croissance permettant d'obtenir des fils d'environ  $10 \mu\text{m}$ , le flux de silane est coupé et la croissance verticale des nanofils est poursuivie pour une longueur de  $15 \mu\text{m}$  supplémentaires. Le segment obtenu est constitué de GaN non intentionnellement dopé (GaN n-i-d). Le dopage résiduel, de type n, est compris entre  $1 \times 10^{17}$  et  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

Les conditions de croissance sont ensuite modifiées de façon à favoriser la croissance latérale le long des directions non polaires du GaN pour former une hétérostructure cœur-coquille. J'ai étudié deux types d'hétérostructure au cours de ma thèse : la première est constituée d'une série de puits quantiques InGaN / GaN et la seconde d'un segment large d'InGaN.

### 2.1 Hétérostructure à puits quantiques

Dans le cas de l'hétérostructure à puits quantiques, la partie supérieure des nanofils est recouverte par cinq puits quantiques InGaN/GaN non intentionnellement dopés. Trois échantillons (échantillon T1164, T1165 et T1163) ont été épitaxiés à des températures différentes pour la croissance de l'InGaN ( $T_1 = 710^\circ\text{C}$ ,  $T_2 = 730^\circ\text{C}$  et  $T_3 = 750^\circ\text{C}$ ) afin d'obtenir des puits quantiques avec des taux d'indium différents [40]. Plus la température est basse, plus le taux d'indium incorporé dans les puits est élevé.

Des mesures de calibration réalisées par spectrométrie de masse à ionisation secondaire avec analyseur de temps de vol (ToF-SIMS) ainsi que des caractérisations par microscopie électronique à transmission (MET) indiquent que l'épaisseur des puits (barrières) est de  $1.3 \pm 0.2 \text{ nm}$  ( $10 \pm 1 \text{ nm}$ ) et que le taux moyen d'indium dans les puits est de l'ordre de 24%, 20% et 15% pour les échantillons T1164, T1165 et T1163 respectivement [36].

Pour finir, une coquille de 300nm de GaN :Mg avec un dopage de type p est épitaxiée à 920°C sous flux d'azote en ajoutant le biscyclopentadiénylmagnésium comme précurseur, source des atomes de magnésium. Une étape de recuit à 750°C est effectuée sous flux d'azote pendant 20 min à la fin de la croissance afin d'activer le dopage p [41], [42]. Le dopage effectif à température ambiante après recuit est estimé à  $p \sim 6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  d'après des mesures effectuées sur des couches minces épitaxiées dans des conditions identiques. Un schéma de la structure est présenté dans la Figure 10b. Il est accompagné d'une image MEB (Figure 10a) montrant un fil après croissance sur le substrat de saphir. La Figure 10c montre deux images MET. Celle du bas correspond à une section transverse d'un fil et met en évidence l'hétérostructure radiale à Multi-Puits Quantiques (MPQ). L'image du haut a été obtenue sur une coupe longitudinale au niveau du sommet d'un fil. Elle révèle que l'InGaN s'est formé aussi bien sur les facettes latérales que sur la facette supérieure du fil : les nanofils possèdent donc deux systèmes de multi-puits quantiques, l'un radial et l'autre axial. L'étude MET a été réalisée sur un échantillon identique en tout point à celui étudié au cours de ce chapitre, à la seule différence que la dernière coquille de p-GaN n'a pas été épitaxiée. J'ai simulé la structure de bande à l'équilibre le long d'un rayon du fil dans le cadre d'un modèle unidimensionnel en résolvant de manière auto-cohérente les équations de Poisson et de Schrödinger à l'aide du logiciel Nextnano<sup>3</sup> [43]. Les paramètres du GaN et de l'InGaN utilisés lors de la simulation proviennent des références [44], [45]. Le dopage résiduel du GaN non intentionnellement dopé a été fixé à  $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . Le résultat de la simulation est montré dans la Figure 10d. L'origine des énergies, matérialisée par le trait horizontal en pointillé, correspond au niveau de Fermi. D'après le profil de bande, la zone de charge d'espace (ZCE) de la jonction p-n s'étend sur environ 280 nm, principalement dans la coquille de GaN dopé p en raison de son dopage moins élevé que celui du GaN n-i-d. On constate par ailleurs que la structure de bande présente un aplatissement dans la région des puits. Cet effet n'est pas dû à la jonction p-n : il provient du dopage résiduel des barrières et du cœur, comme cela est montré dans la Figure 11 où sont superposés la structure de bande calculée précédemment et la structure de bande obtenue en remplaçant la partie dopée p par une partie non intentionnellement dopée avec le même niveau de dopage que le cœur (structure « n-n »). Les électrons provenant du dopage des barrières et du cœur s'accumulent dans les puits. Les dopants ionisés dans le GaN déplété créent un potentiel électrique qui déplace l'énergie des bandes de conduction et de valence. La situation d'équilibre dans la structure n-n est obtenue par la règle de neutralité électrique dans l'ensemble zone déplétée + puits. On remarquera que la densité surfacique d'électrons dans les puits est assez élevée, de l'ordre de  $\sim 8 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ .

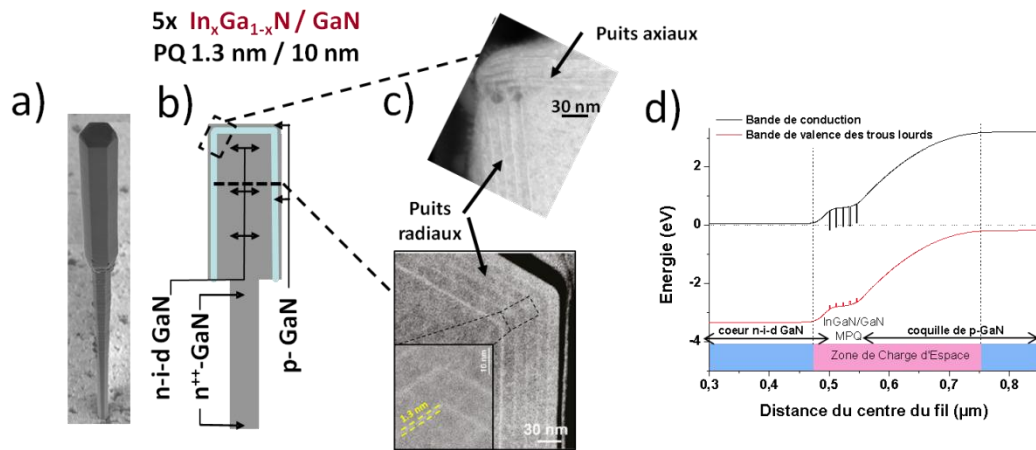


Figure 10 a) Image MEB d'un fil après croissance se tenant verticalement sur le substrat de saphir. L'échantillon est observé avec une inclinaison de 45°. b) Schéma de la structure du fil au niveau d'une section longitudinale. c) Image TEM d'une section transverse (bas) et longitudinale (haut) d'un fil montrant les cinq puits quantiques InGaN/GaN de l'hétérostructure cœur-coquille. La coupe transverse met en évidence la présence des puits à la fois sur les facettes latérales et sur la facette supérieure des nanofils. d) Structure de bande le long d'un rayon du fil calculé avec Nextnano3.

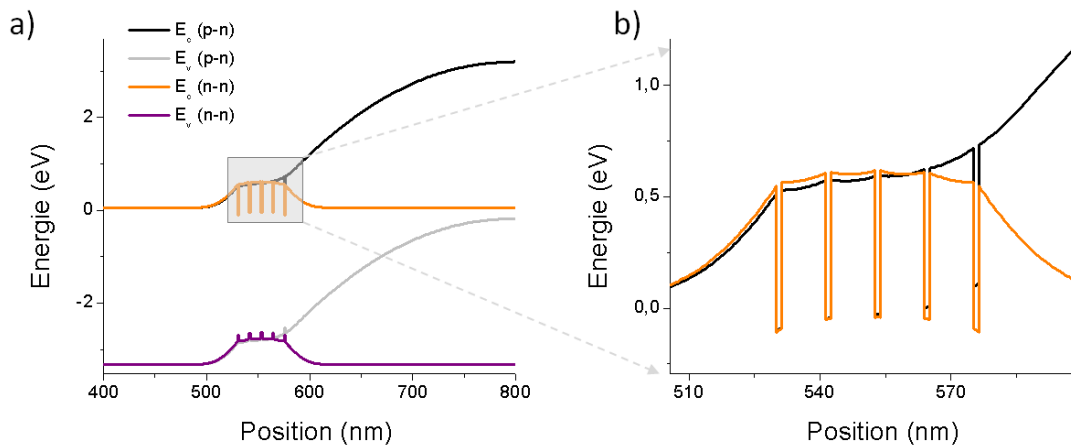
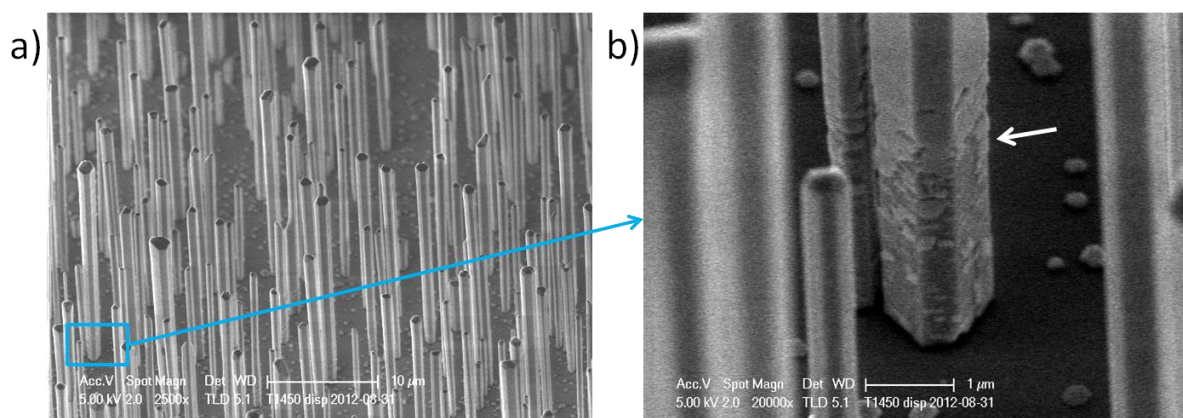


Figure 11 La courbure des bandes au niveau des puits est causée par le dopage non intentionnel du GaN des barrières et du cœur : les électrons s'accumulent dans les puits et les barrières sont au contraire dépeuplées.

## 2.2 Hétérostructure à segment radial large

Dans le cas de l'hétérostructure à segment large, la partie supérieure des nanofils est recouverte par un unique segment d'InGaN non intentionnellement dopés au lieu des 5 puits quantiques InGaN/GaN. La largeur nominale du segment est estimée à 13 nm, la durée de croissance du segment ayant été multipliée par 10 par rapport aux puits quantiques. Les autres conditions n'ont pas été modifiées et ont été calquées sur celles de l'échantillon à puits quantiques avec le plus faible taux d'indium. Les mesures de photoluminescence et d'électroluminescence présentées dans le paragraphe suivante indiquent que le taux d'indium dans le segment est de l'ordre de 0.2. Cette valeur plus élevée que dans l'échantillon à puits quantiques n'est pas surprenante en raison du phénomène de ségrégation de l'indium[46]–[48] qui apparaît en raison des faibles miscibilités des matériaux InN et GaN et des différences de paramètre de maille entre l'InGaN et le GaN. On peut également s'attendre à ce que ce phénomène conduise à une inhomogénéité du taux d'indium le long du rayon du fil : d'après les auteurs de [46] qui font une analogie avec la croissance de puits quantiques InGaAs/GaAs, on peut s'attendre à ce que le taux d'indium augmente au fur et à mesure de

la croissance de la couche d'InGaN. Par ailleurs, il faut également noter que la défaillance d'un capteur de température dans le bâti a conduit à une température réelle inférieure de quelques degrés à la température de consigne. Cela conduit à une augmentation de l'incorporation d'indium. Pour cette raison également, l'hétérostructure cœur-coquille est présente quasiment jusqu'à la base des fils et non uniquement sur leur partie supérieure, comme illustré dans la Figure 12 qui montre une image MEB après croissance, sur substrat de saphir.



**Figure 12** Image MEB de l'échantillon à segment large d'InGaN. a) Vue tiltée à 30° de la surface de l'échantillon après croissance sur substrat de saphir. b) Agrandissement au niveau du pied d'un fil mettant en évidence la fin de l'hétérostructure cœur-coquille. La fin de l'hétérostructure est signalée par la flèche blanche. L'hétérostructure apparaît plus claire que le pied de  $n^{++}$ -GaN.

### 3 Caractérisation optique des nanofils

#### 3.1 Hétérostructure à puits quantiques

Les nanofils des échantillons T1163, T1164 et T1165 ont été caractérisés optiquement par micro-photoluminescence ( $\mu$ PL). L'échantillon T1163 à plus faible taux d'indium a également été caractérisé par cathodoluminescence (CL). Les résultats de ces deux approches sont en grande partie redondants. Grâce à sa meilleure résolution spatiale, l'étude de CL a cependant permis de mettre en évidence de façon non équivoque la contribution spectrale des puits axiaux. C'est un résultat clef qui a permis d'interpréter les mesures d'électroluminescence. Dans ce paragraphe, je présente donc principalement les mesures de CL. Je présenterai ensuite les résultats de photoluminescence qui permettent de confirmer la variation du taux d'indium dans les puits en fonction de la température de croissance.

##### 3.1.1 Cathodoluminescence (CL)

L'étude de CL a été menée par Mathieu Kociak et Luiz Fernando Zagonel du Laboratoire de Physique des Solides de l'Université Paris Sud[49]. Le système employé possède une haute résolution spectrale et un angle de collection maximisé. Il est constitué d'un spectromètre de 300 mm de focale associé à une caméra CCD permettant d'acquérir en parallèle les données spectrales avec une résolution de 1 nm et est installé dans un microscope électronique à balayage en transmission (MEBT) VG HB 501. Les nanofils mesurés au cours de cette étude ont donc été dispersés sur une grille métallique recouverte d'une fine peau de carbone trouée. Une image d'un fil sur grille de microscopie est



présenté dans la Figure 14a. Le faisceau du MEBT percute l'échantillon à incidence normale avec une énergie de 60 keV. Le courant de sonde est d'environ 300 pA. La température du porte-échantillon est maintenue à 150 K par un système de refroidissement à l'azote liquide. La durée d'intégration pour chaque pixel est de l'ordre de 150 ms.

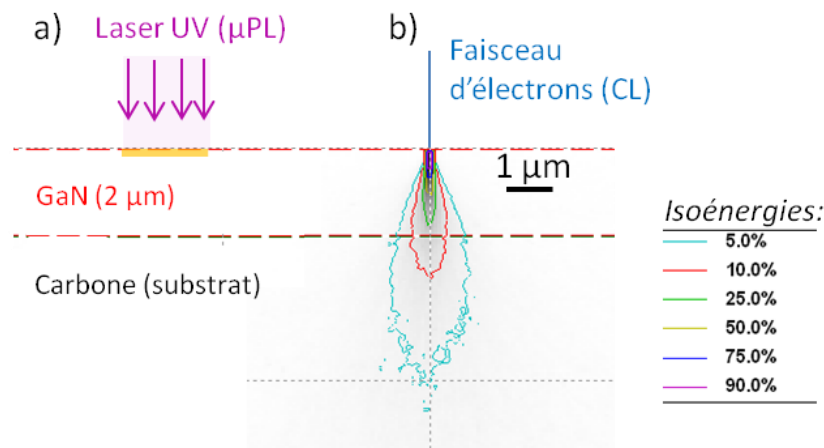
Le principe de la CL consiste à balayer la surface de l'échantillon avec un faisceau focalisé d'électrons. Les paires électrons-trous générées dans le nanofil peuvent se recombiner radiativement en émettant un photon. Les photons qui sont extraits du nanofil sont collectés et analysés à l'aide du spectromètre. Pour chaque énergie de photon, on peut alors reconstruire une cartographie de l'échantillon représentant l'intensité de la luminescence en fonction de la position d'excitation. La résolution spatiale obtenue avec ce dispositif de mesure n'est pas égale à la taille du faisceau : il faut prendre en compte le volume dans lequel sont générées les paires électron-trous. La diffusion des porteurs générés et le phénomène d'absorption-réémission des photons tendent également à élargir le volume dont provient la luminescence mesurée. Afin d'estimer ce dernier, j'ai simulé par la méthode Monte-Carlo et à l'aide du logiciel Casino[50]–[52] les trajectoires de 200 000 électrons possédant une énergie initiale de 60 keV. Le faisceau d'électrons est supposé avoir un diamètre de 10 nm lorsqu'il percute la surface de l'échantillon. Le nanofil sur la grille de microscopie est modélisé par un système bidimensionnel constitué d'une couche de GaN de 2  $\mu\text{m}$  d'épaisseur reposant sur un substrat en carbone. Le résultat de la simulation est montré dans la Figure 13b qui présente selon une coupe orthogonale à la surface de l'échantillon les courbes d'isoénergie des électrons incidents. Les courbes sont tracées pour différentes valeurs d'énergie résiduelle exprimée en pourcentage de l'énergie initiale. Si l'on considère la courbe correspondant à 5 % de l'énergie initiale (les électrons ayant dissipé 95 % de leur énergie se situent donc à l'intérieur du volume délimité par cette courbe), on constate qu'elle forme un cône avec un demi-angle au sommet d'environ  $21^\circ$ , ce qui correspond à un volume de GaN d'environ  $5 \mu\text{m}^3$ . La base du cône s'étend sur environ  $1,5 \mu\text{m}$  au niveau de l'interface avec la peau de carbone. Cependant, il faut noter que d'après la courbe d'isoénergie correspondant à 25 % de l'énergie initiale (courbe verte), 75% des paires générées dans l'ensemble du système GaN + carbone et donc un pourcentage encore plus important des paires générées uniquement dans le GaN, sont localisées dans le prolongement du faisceau incident dans un cylindre d'environ 280 nm de large et  $1,8 \mu\text{m}$  de haut, soit un volume de  $0,4 \mu\text{m}^3$  environ. On peut conclure de cette simulation que la CL sonde les propriétés optiques du fil sur toute sa profondeur et sur une largeur de l'ordre du micron.

A titre de comparaison, il est intéressant de faire un calcul similaire pour la  $\mu\text{PL}$ . Le banc de  $\mu\text{PL}$  utilise un laser  $\text{Ar}^{2+}$  continu à fréquence doublée émettant à 244 nm (5,08 eV). Le diamètre du spot laser après focalisation est compris entre 1 et 2  $\mu\text{m}$ . Le coefficient d'absorption à 244 nm est de l'ordre de  $2 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$  [53], ce qui correspond à une longueur d'absorption de 50 nm. En utilisant la loi de Beer-Lambert, on peut donc estimer que 95% des paires électrons-trous sont générées par le laser sur une profondeur de  $3 \times 50 \text{ nm} = 150 \text{ nm}$ , ce qui équivaut donc à un volume de  $0,45 \mu\text{m}^3$ . Ceci est illustré dans la Figure 13a : le rectangle orange représente le volume dans lequel sont générés 95% des paires électrons-trous en  $\mu\text{PL}$ . On voit donc que la  $\mu\text{PL}$  et la CL sonde des volumes de taille relativement proche mais de géométrie très différente.

Il est également intéressant de comparer les taux de génération moyen en  $\mu\text{PL}$  et CL : en supposant que la puissance du laser focalisé sur l'échantillon est de 1 mW, on obtient un taux de génération de l'ordre de  $2,7 \cdot 10^{27} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ . Dans le cas de la CL réalisée à 60 kV, avec un courant de faisceau de

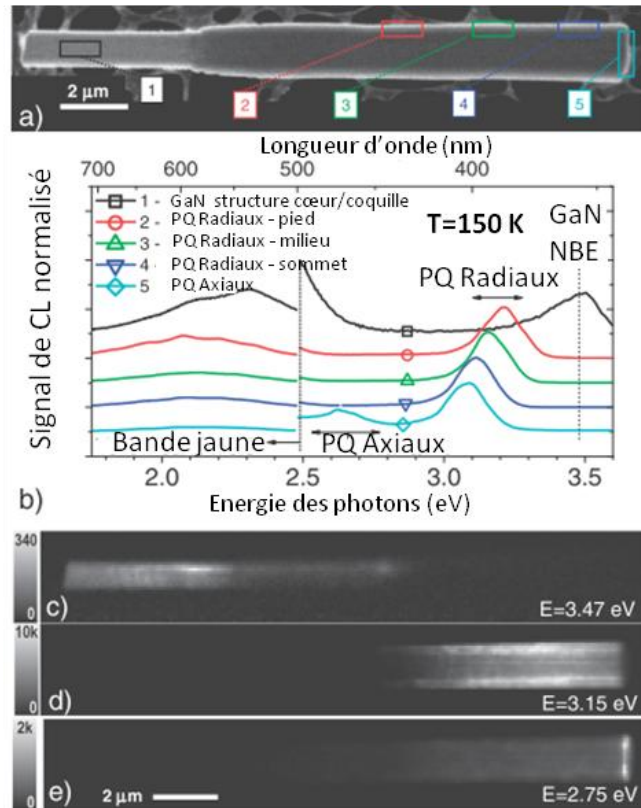
300 pA, le taux de génération moyen est de  $3.3 \cdot 10^{24} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$  si l'on suppose que l'énergie moyenne d'ionisation de 10.04 eV<sup>4</sup>. Le taux de génération en CL est donc inférieur sur trois ordres de grandeur à celui de la  $\mu\text{PL}$ .

Les résultats de CL sur un fil de l'échantillon à plus faible taux d'indium (T1163) sont présentés dans la Figure 14. La Figure 14b montre les spectres normalisés mesurés aux positions indiquées dans la Figure 14a. Sur la base du fil constitué de  $\text{n}^{++}\text{-GaN}$  sans hétérostructure cœur-coquille (position n°1), on observe un pic de luminescence à 3.47 eV. Il s'agit de l'émission de bord de bande du GaN (*Near Band Edge* ou NBE). Le spectre contient également une émission intense et large entre 2.0 et 2.5 eV qui correspond à la bande jaune du GaN et qui est liée aux défauts [54], [55]. On retrouve cette bande jaune sur les spectres mesurés sur l'hétérostructure cœur-coquille (positions 2 à 5). Un pic à une énergie inférieure à l'énergie de bande interdite du GaN y est observé. Ce pic se décale de 3.2 à 3.1 eV à mesure que l'on se déplace vers le sommet du fil. Cette contribution spectrale est attribuée à l'émission des puits quantiques radiaux d'InGaN/GaN. Le décalage de la position en énergie du pic le long du fil peut provenir d'un gradient d'épaisseur (puits plus fin à la base qu'au sommet) ou d'un gradient de composition (puits plus riche en indium au sommet que sur le pied de l'hétérostructure).



**Figure 13** Schéma d'une vue en coupe d'un échantillon constitué d'une couche de GaN de 2 μm reposant sur un substrat en carbone a) Le rectangle orange représente le volume dans lequel sont générés 95% des paires électrons trous lorsque le GaN est illuminé avec un laser UV à 244 nm focalisé sur une tâche de 2 μm. b) Courbes d'isoénergie des électrons pénétrant en incidence normale avec une énergie de 60 keV. La légende indique les énergies résiduelles des électrons exprimées en pourcentage de l'énergie initiale.

<sup>4</sup> cf. Chapitre 2, équation Eq. 3.2



**Figure 14** a) Image en champ sombre d'un fil étudié en MEBT qui provient de l'échantillon à plus faible taux d'indium b) Spectre de CL collecté aux positions indiquées en a. On distingue les contributions provenant de l'émission de bord de bande du GaN (NBE), des puits quantiques (PQ) radiaux et axiaux ainsi que de la bande jaune du GaN c) Cartographie de CL à 3.47 eV, d) 3.15 eV et e) 2.75 eV.

Lorsque le faisceau d'électrons excite le sommet du fil (position n°5), une nouvelle contribution centrée à 2.75 eV est observable. Comme en témoigne la cartographie présentée dans la Figure 14e, l'émission à cette énergie est fortement localisée sur le sommet du nanofil. Elle est attribuée à la présence des puits quantiques axiaux. Le décalage en énergie par rapport aux puits quantiques radiaux peut provenir d'une différence d'épaisseur des puits (la cinétique de croissance sur les plan M et C de la structure wurtzite n'étant a priori pas identiques) ainsi que d'une différence de composition du puits. Le caractère pyro- et piezoélectrique du GaN et de l'InGaN induit également un champ électrique additionnel le long de l'axe (0001) qui modifie l'énergie des états confinés des puits quantiques par effet Stark quantique [56]–[59].

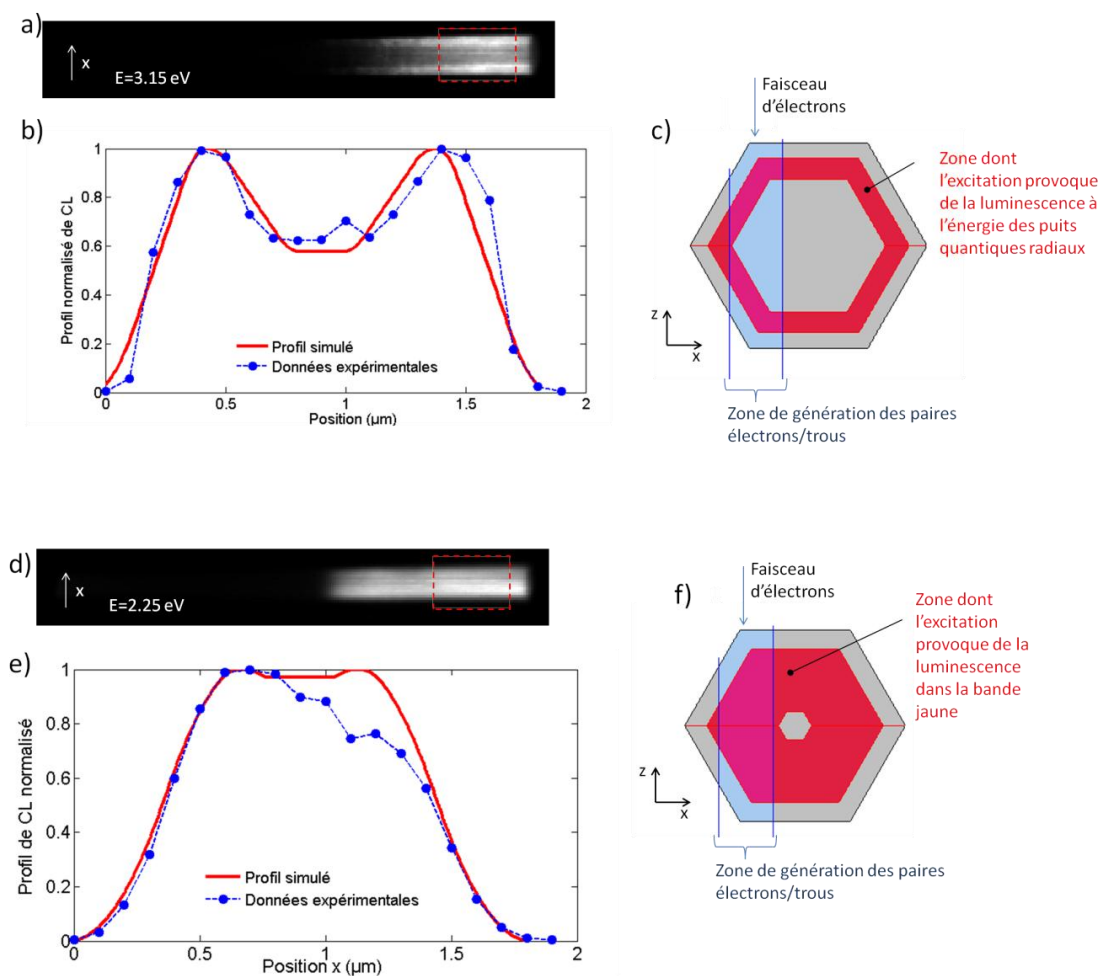
Malgré le fait que le fil soit constitué en très grande majorité de GaN au niveau de sa partie supérieure, l'émission de bord de bande du GaN est quasiment absente sur la coquille (comme en témoigne également la cartographie d'intensité à 3.47 eV montré dans la Figure 14c). Cette caractéristique se retrouve également constamment dans les mesures de  $\mu$ PL. Cette observation peut s'expliquer par deux raisons. 1) Les puits quantiques peuvent capturer les porteurs de charges générés et le confinement y augmente le taux de recombinaison. 2) Il y a également le phénomène d'absorption-réémission des photons : les photons émis à une énergie proche du bord de bande du GaN ont une probabilité non négligeable d'être absorbés par le GaN avant d'être extraits du fil et ce d'autant plus que l'indice optique élevé conduit à un angle de réflexion totale interne faible et donc à une forte probabilité de réflexion à l'interface GaN/air. En étant absorbé, le photon crée une nouvelle paire électron-trou qui peut se recombiner par l'intermédiaire de nombreux mécanismes

autre que la recombinaison radiative dans le GaN : il peut s'agir de recombinaison non radiative ou de recombinaison radiative après piégeage dans un puits ou au niveau d'un défaut. La recombinaison radiative conduit dans ce cas à l'émission d'un photon à une énergie inférieure à l'énergie de bande interdite du GaN. A cette énergie, le coefficient d'absorption du GaN est très faible et seuls les puits quantiques qui ne représentent qu'une proportion faible du volume du fil sont susceptibles de réabsorber le photon. Ce dernier a donc une probabilité forte de s'échapper du fil sans avoir été absorbé.

Les cartographies de la Figure 14 fournissent par ailleurs des éléments de réflexion intéressants. La Figure 14e montre l'intensité de CL à l'énergie d'émission des puits quantiques axiaux. On remarque que le signal associé aux puits axiaux est très localisé : le signal est intense sur une largeur variant d'un à trois pixels correspondant à une largeur entre 150 nm et 450 nm, soit la largeur du cylindre d'excitation obtenu précédemment par la simulation Monte-Carlo. Cela semble donc indiquer que la longueur de diffusion des trous dans le cœur de GaN est au plus de l'ordre de quelques centaines de nanomètre, ce qui est cohérent avec les valeurs de la littérature [60]–[63].

Sur la Figure 14d qui montre la cartographie d'intensité à l'énergie d'émission des puits quantiques radiaux (3.15 eV), on remarque par ailleurs que le signal n'est pas homogène sur la coquille. L'intensité de la CL est notamment moins importante sur la facette centrale que sur les deux facettes latérales. Ce phénomène est étudié plus en détails dans la Figure 15. La Figure 15b montre le profil d'intensité dans une direction orthogonale à l'axe du fil. Afin de diminuer le bruit de la mesure, le profil a été obtenu en moyennant sur 30 pixels le long de l'axe du fil. La région sur laquelle le profil a été mesuré est montrée dans la Figure 15a par le rectangle rouge. Pour comprendre ce profil, j'ai utilisé un modèle très simple : j'ai supposé que le volume de génération de paires électrons-trous est un cylindre dont la largeur est un paramètre ajustable dans le calcul. La distribution des paires électrons-trous générées est supposée uniforme dans l'ensemble de ce volume. Je suppose ensuite que la luminescence à l'énergie étudiée provient uniquement des paires générées dans une partie du fil, cette partie étant appelée la « zone de collecte ». Si l'on considère par exemple la luminescence des puits quantiques, la zone de collecte correspond à la région dans laquelle une fraction significative des paires électron-trou diffusent jusqu'aux puits quantiques et y sont capturées. La zone de collecte des puits quantiques correspond donc grossièrement à la région située à une distance des puits quantiques inférieure à la longueur de diffusion des porteurs minoritaires. Avec ces hypothèses, on peut donc estimer que l'intensité de CL est proportionnelle au recouvrement entre le volume de génération et la zone de collecte. Les paramètres d'ajustement sont la profondeur et l'épaisseur de la zone de collecte ainsi que la largeur de la zone de génération. Le meilleur ajustement est présenté dans la Figure 15b. Il a été obtenu en supposant que la zone de collecte possède une épaisseur de 160 nm et qu'elle est située à 120 nm de la surface du fil. La largeur de la zone de génération est fixée à 200 nm. Ces valeurs peuvent sembler relativement faibles. Elles tendent à confirmer le fait que la longueur de diffusion des porteurs minoritaires est vraisemblablement largement inférieure au micron, probablement de l'ordre de la centaine de nanomètres. Néanmoins, il faut considérer ces valeurs avec grande précaution étant donné l'extrême simplicité du modèle. La conclusion que l'on peut affirmer avec certitude est que les variations d'intensité de CL entre la facette centrale et les facettes latérales proviennent d'un effet géométrique lié à une zone de collecte des puits quantiques limitée.

Afin de vérifier la cohérence de la valeur de la largeur de la zone de génération, une étude similaire a été menée sur la cartographie à 2.25 eV correspondant à la bande jaune du GaN. Le profil expérimental est montré dans la Figure 15e. Il a été mesuré sur la même région que précédemment. On constate qu'il est asymétrique, ce qui indique probablement une variation de qualité cristalline au sein du fil. Dans la simulation, cette fois-ci, seules les dimensions de la zone de collecte sont ajustables, la largeur de la zone de génération étant fixe. Comme illustré dans la Figure 15e, en choisissant une zone de collecte située à 160 nm de profondeur, le profil simulé reproduit bien la courbe expérimentale, ce qui est cohérent avec la structure : la bande jaune généralement disparaît avec le dopage Mg de la coquille[54]. Elle provient donc principalement du GaN n-i-d. L'ajustement est très légèrement meilleur lorsque que la zone de collecte ne s'étend pas jusqu'au cœur du fil mais exclut une section de 210 nm de diamètre. Cela pourrait provenir du fait que le cœur a été épitaxié à haute température et a donc une contribution plus faible dans la bande jaune.



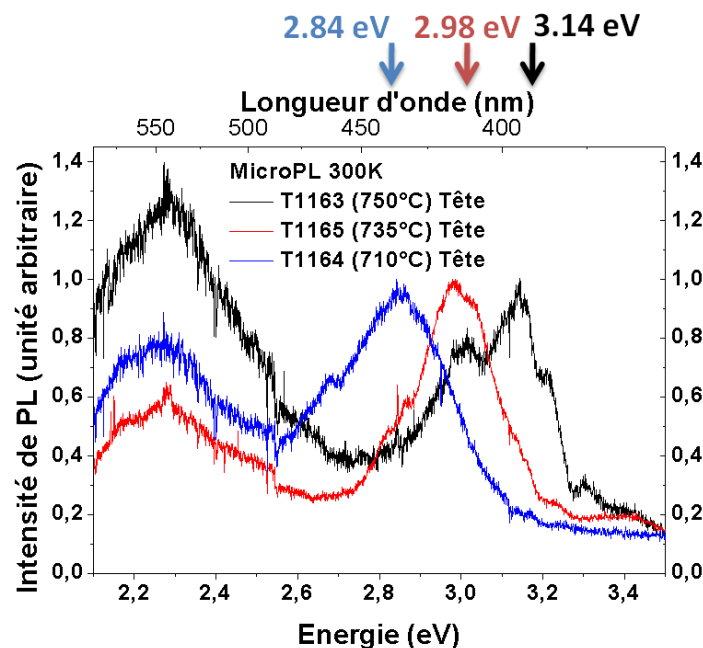
**Figure 15 a) Cartographie de CL à 3.15 eV (Puits quantiques radiaux) d'un fil de l'échantillon à plus faible taux d'indium. b) En bleu, profil normalisé de CL mesuré dans la direction orthogonale à l'axe du fil et moyenné sur une largeur de 30 pixels dans la zone indiquée par le rectangle en pointillé rouge de la figure a. En rouge : courbe calculée en supposant que le signal émis à 3.15eV est produit par les porteurs de charges générés dans la région rouge présentée dans la figure c. c) Vue en coupe dans un plan orthogonal à l'axe du fil. Pour une position du faisceau donnée, l'intensité de l'émission à 3.15 eV est supposée proportionnelle au recouvrement entre la zone d'excitation modélisée par un cylindre de 0.203 μm de large et la zone de collection des puits quantiques représentée en rouge. d) Cartographie de CL à 2.25 eV (Bande jaune) d'un fil de l'échantillon à plus faible taux d'indium. e) En bleu, profil normalisé de CL mesuré dans la direction orthogonale à l'axe du fil et moyenné sur une largeur de 30 pixels dans la zone indiquée par le rectangle en pointillé rouge de la figure a. En rouge : courbe calculée en supposant que le signal émis à 2.25 eV est produit par les porteurs de charges générés dans la région rouge présentée dans la figure f. f) Vue en coupe dans un plan orthogonal à l'axe du fil.**

*Pour une position du faisceau donnée, l'intensité de l'émission à 2.25 eV est supposée proportionnelle au recouvrement entre la zone d'excitation modélisée par un cylindre de 0.203  $\mu\text{m}$  de large et la zone représentée en rouge.*

### 3.1.2 Micro-photoluminescence ( $\mu\text{PL}$ )

Afin de vérifier l'accordabilité de l'émission des puits quantiques en fonction des conditions de croissance, j'ai caractérisé les échantillons T1163, T1164 et T1165 en  $\mu\text{PL}$ . Pour cela, les nanofils ont été détaché du substrat de croissance à l'aide d'ultrason dans une solution d'éthanol. Des gouttes des solutions contenant les fils en suspension ont ensuite été déposées sur un substrat de silicium recouvert de 300 nm de silice. L'échantillon est ensuite placé dans un cryostat et est excité à l'aide d'un laser continu à ion  $\text{Ar}^{++}$  muni d'un cristal doubleur et émettant à 244nm. Le laser est focalisé sur la surface de l'échantillon à l'aide d'un objectif de microscope UV avec une ouverture numérique de 0,4. La tache laser possède un diamètre d'environ 2  $\mu\text{m}$ . La puissance du laser est ajustable entre 1 mW et environ 100 mW. Pour le repérage des nanofils, l'échantillon est éclairé par une source UV et imagé à l'aide d'une caméra dédiée. Les spectres de photoluminescence ont été mesurés à l'aide d'un spectromètre HR460 équipé d'un réseau avec 600 traits/mm et d'une caméra CCD permettant d'avoir une résolution de l'ordre de 1 meV.

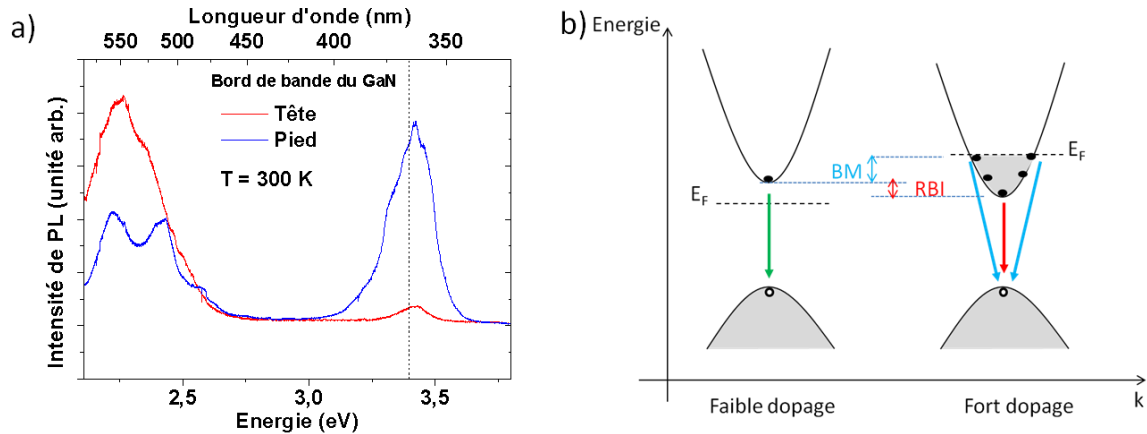
Des spectres de  $\mu\text{PL}$  représentatifs des trois échantillons T1163, T1164 et T1165 sont présentés dans la Figure 16. Ils ont été mesurés à 300K avec une puissance en sortie du laser de 5 mW en positionnant la tâche du faisceau laser au milieu de l'hétérostructure du fil. Comme dans les mesures de CL, on observe une contribution large à basse énergie centré à 2.25 eV qui correspond à la bande jaune associée aux défauts du GaN. La contribution à plus haute énergie est attribuée à l'émission des puits quantiques radiaux. On constate que la position du pic se déplace de 2.84 eV à 3.14 eV lorsque la température de croissance augmente comme attendu. La largeur importante et les épaulements proviennent vraisemblablement d'inhomogénéités du taux d'indium au sein des puits.



*Figure 16 Spectre de  $\mu\text{PL}$  mesuré à 300 K en plaçant la tâche laser au niveau de l'hétérostructure cœur-coquille des nanofils (tête).*

### 3.2 Hétérostructure à segment large

Les spectres de  $\mu$ PL ont été mesurés à température ambiante avec une puissance laser de 20 mW sur des fils de l'échantillon à segment large d'InGaN dispersé sur un substrat Si/SiO<sub>2</sub>. Des spectres représentatifs de cet échantillon sont présentés dans la Figure 17a. L'un des spectres correspond au pied du fil (région proche du substrat de saphir avant dispersion sur Si/SiO<sub>2</sub>) et l'autre à la tête (proche du sommet du fil).



**Figure 17 a) Spectres de  $\mu$ PL à 300 K mesuré sur un fil de l'échantillon à segment large d'indium (puissance laser de 20 mW). Le pied du fil correspond à la région proche du substrat de saphir avant dispersion du nanofil. b) Schéma du diagramme de bande dans le cas du GaN faiblement et très fortement dopé. Le fort dopage induit une renormalisation de l'énergie de bande interdite (RBI) et des transitions indirectes dans l'espace des  $k$  - effet Burstein-Moss (BM).**

La contribution à haute énergie provient de l'émission de bord de bande du GaN. Sur le spectre du pied, on observe des épaulements de part et d'autre du pic qui s'expliquent par le fort dopage du GaN : comme illustré dans la Figure 17b, le fort dopage induit une renormalisation de l'énergie de bande interdite (RBI), responsable de l'élargissement du pic vers les plus basses énergies. Par ailleurs, l'élargissement vers les hautes énergies est attribué à la recombinaison indirecte dans l'espace des  $k$  entre des électrons libres jusqu'au niveau de Fermi et des trous localisés dans la bande de valence. Il s'agit de l'effet Burstein-Moss (BM) [64], [65].

Dans les deux spectres, on observe une contribution large à basse énergie centrée à 2.25 eV. Cette contribution provient en partie de la bande jaune du GaN. Il n'est cependant pas exclu que l'InGaN y contribue : les pics que l'on observe sur le spectre issu du pied du nanofil peuvent notamment provenir d'inhomogénéités d'alliage dans l'InGaN. La contribution relative de l'InGaN par rapport à la bande jaune du GaN est difficile à estimer. Néanmoins, on peut s'attendre à ce que la contribution radiative de l'InGaN soit relativement faible en comparaison des échantillons à puits quantiques en raison du moins bon confinement des porteurs. De plus, le recouvrement des fonctions d'onde des électrons et des trous dans le segment large est moins bon que dans l'échantillon à puits quantiques en raison de la séparation induite par le champ électrique de la jonction. On notera également que la recombinaison non radiative dans l'InGaN peut être importante à température ambiante. Pour cette raison, la  $\mu$ PL a également été mesurée à 4 K et est présentée dans la Figure 18. Une contribution très large et structurée observée entre 2.1 et 3.2 eV est attribuée à l'InGaN. Cela confirme la présence de fortes inhomogénéités d'alliage. On remarque la présence de pics fins qui indiquent la présence de clusters riches en indium se comportant comme des boîtes quantiques. La contribution à haute énergie provient du GaN. Le pic est situé à une énergie de 3.53 eV, qui est supérieure à la

valeur de 3.47 eV attendue dans le GaN non dopé. Cela s'explique comme précédemment par l'effet Burstein-Moss. La largeur totale à mi-hauteur du pic est de 120 meV, ce qui cohérent avec l'estimation du dopage de l'ordre de  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$  dans le cœur de n-GaN [64].

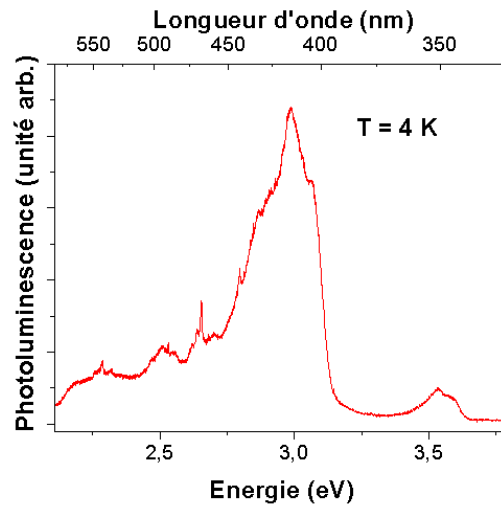


Figure 18 Spectre de microphotoluminescence mesuré à 4 K sur un nanofil de l'échantillon T1450

## 4 Fabrication des dispositifs à nanofil unique

Afin de réaliser des dispositifs à fil unique, j'ai utilisé la procédure illustrée dans la Figure 19 : les nanofils ont tout d'abord été détachés de leur substrat en plaçant l'échantillon dans une solution d'éthanol, elle-même plongée dans un bain à ultrason. La solution de nanofils en suspension est ensuite dispersée sur un substrat de Si/SiO<sub>2</sub> (300nm) sur lequel des marques d'alignement ont été préalablement fabriquées. Les fils sont encapsulés par enduction centrifuge dans une couche de  $\sim 500$  nm de silsesquioxane hydrogéné (*hydrogen silsesquioxane* ou *HSQ*). Ce polymère, transformé en SiO<sub>x</sub> par un recuit de 60 min à 500°C, permet d'aplanir la surface de l'échantillon et apporte ainsi un support solide assurant la continuité des contacts métalliques. L'excès de HSQ est ensuite gravé pendant une minute à l'aide d'une solution de HF : H<sub>2</sub>O (1 : 200). Les contacts sont finalement fabriqués par deux étapes de lithographie électronique pour lesquelles une couche de 500 nm de PMMA obtenue par enduction centrifuge est utilisée comme résine électronique. Afin d'obtenir une faible résistance de contact, un contact métallique Ni (10nm)/Au (200nm) est déposé par évaporation sous vide sur la coquille de GaN dopé p [66]. De même, un contact Ti (5 nm)/Al (20 nm)/Ti (10 nm)/Au (200 nm) est évaporé sur le pied de n<sup>++</sup>-GaN [67]. Une image MEB d'un fil contacté est présentée dans la Figure 19d.

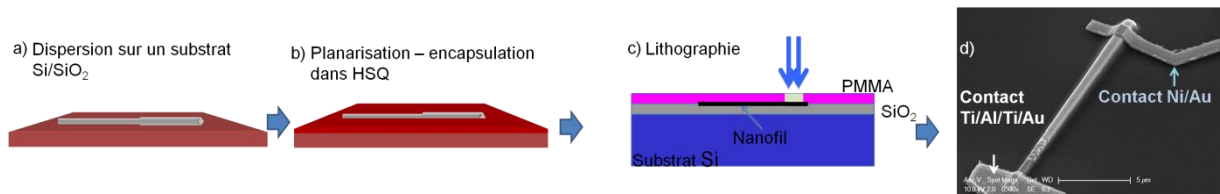


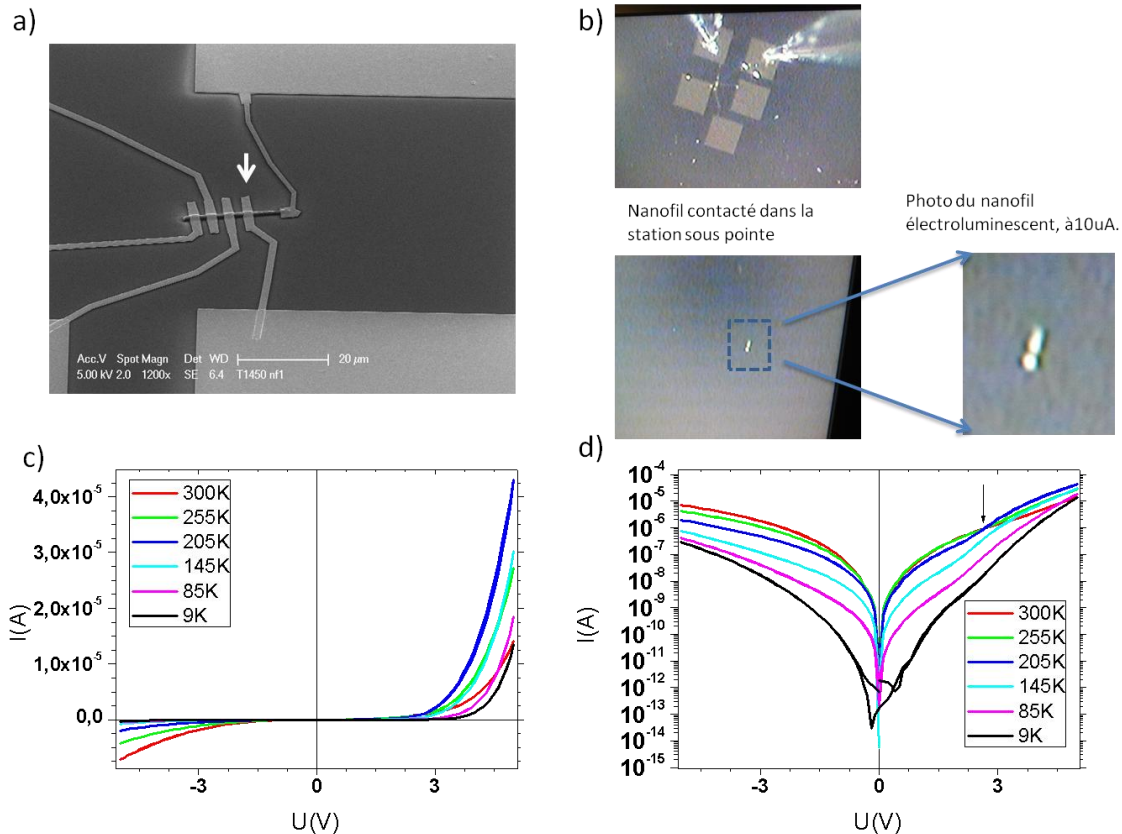
Figure 19 Procédé de fabrication des dispositifs à nanofil unique



## 5 Caractérisation électrique

Dans cette section, je présente les caractérisations électriques des nanofils. Je discute tout d'abord des nanofils possédant une hétérostructure à segment large et me focalise plus particulièrement sur l'interprétation des caractéristiques courant-tension. Je discuterai ensuite du cas des nanofils à puits quantiques pour lesquels je me suis concentré sur l'interprétation des spectres d'électroluminescence.

### 5.1 Hétérostructure à segment large



**Figure 20** a) Image MEB d'un nanofil après fabrication des contacts. Le contact n est situé à droite. Les quatre autres contacts reposent sur la coquille. b) Image du nanofil contacté dans la station sous pointe. L'image du bas montre la luminescence verte observée à température ambiante pour un courant d'injection de 10  $\mu$ A. c-d) Caractéristiques I-V mesurées entre 9 K et 300 K, entre le contact n et le contact p le plus proche du pied (indiqué par une flèche dans l'image a). Les courbes sont tracées en échelle linéaire (c) et logarithmique (d).

Afin d'identifier les mécanismes de transport et de recombinaison des porteurs de charges dans les structures cœur-coquille, les caractéristiques courant-tension (I-V) de nanofils possédant une hétérostructure de type « segment large » (i.e. 13 nm d'InGaN) ont été mesurées entre 9 K et 300 K. Elles sont tracées dans les Figure 20 c et Figure 20 d en échelle linéaire et logarithmique respectivement. Ces courbes ont été mesurées sur le fil dont l'image MEB est montrée dans la Figure 20 a. Le courant est injecté par le contact p le plus éloigné du sommet (indiqué par une flèche sur l'image MEB).

Tout d'abord, on remarque que, de façon très qualitative, le comportement observé correspond à celui attendu pour un dispositif de type LED : les caractéristiques courant-tension mettent en évidence un comportement redresseur. Le courant augmente rapidement en direct et reste plus

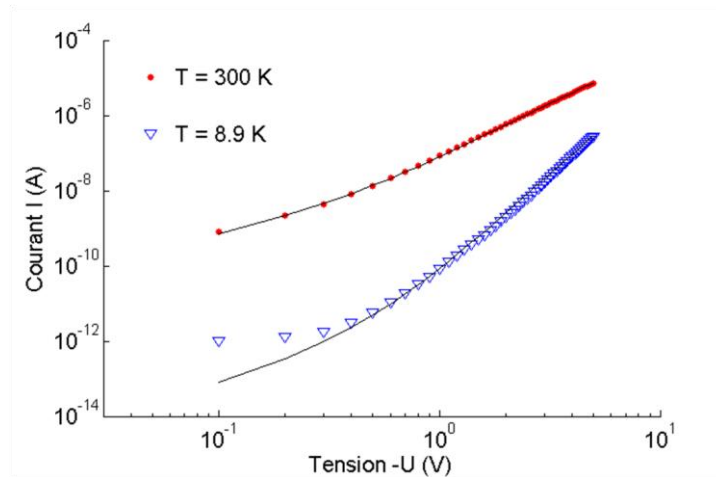
faible en inverse. Le courant en inverse n'est cependant pas négligeable, ce qui témoigne de l'existence de mécanismes de fuite. Lorsque l'on analyse plus finement ces courbes, on constate cependant que le courant évolue de façon complexe en fonction de la tension  $U$  et de la température  $T$ . Pour commencer, analysons le courant de fuite en inverse.

### 5.1.1 Courant de fuite en inverse

D'après les modèles théoriques de la jonction p-n et des LEDs présentés précédemment, le courant en inverse devrait tendre vers une valeur limite qui correspond au courant de saturation  $I_{sat}$  dans les équations Eq. 14 et Eq. 18. Ce courant devrait être par ailleurs très faible devant le courant mesuré en polarisation directe pour des tensions supérieures à quelques  $k_B T/e$ , ce qui n'est pas le cas d'après les courbes de la Figure 20. Cela indique qu'il existe des mécanismes additionnels de génération de courant au sein de la ZCE de la jonction. Deux sources de fuites ont été envisagées précédemment, à savoir la génération Shockley-Read-Hall (SRH) et le transport tunnel.

D'après l'équation Eq. 28, le courant induit par la génération SRH est proportionnel à la largeur de la ZCE et varie donc en fonction de la tension  $U$  comme  $\sqrt{V_{bi} + |U|}$  où  $V_{bi}$  est le potentiel interne de la jonction. Dans notre cas, on constate que le courant varie beaucoup plus rapidement en fonction de  $U$  : par exemple, entre -1.5 et -3 V il varie sur plus d'un ordre de grandeur, quel que soit la température, alors que  $\sqrt{V_{bi} + |U|}$  a une variation relative de l'ordre de la dizaine de pourcents (15 % en prenant  $V_{bi} = 3$  V). On peut donc en conclure que la génération SRH n'est pas le mécanisme qui domine dans notre système polarisé en inverse.

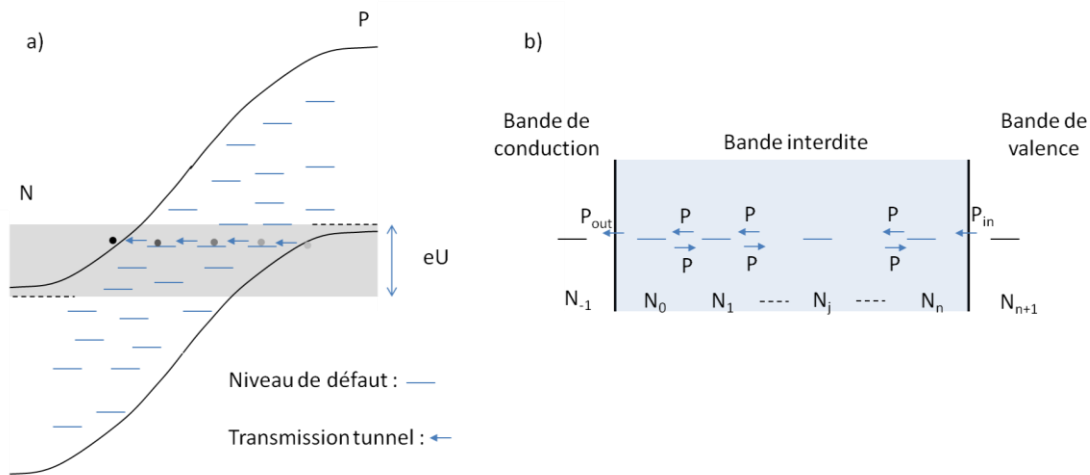
Un autre mécanisme possible est le transport par effet tunnel des porteurs de charges au sein de la jonction p-n. Nous avons vu précédemment que la transmission directe de la bande de valence vers la bande de conduction (de type Zener) est très peu probable. Cependant, le modèle Zener décrit par l'équation Eq. 35 est utilisé par certains auteurs pour analyser le courant de fuite en inverse, en présence de défauts dans la ZCE : Eliseev et al. ont par exemple obtenu un très bon accord avec cette loi dans le cas de structures LED en InGaN :Zn,Si/AlGaIn/GaN [31]. Dans notre cas, en ajustant les trois paramètres du modèle Zener ( $A$ ,  $b$  et  $V_{bi}$  de l'équation Eq. 35), il est en effet possible de très bien reproduire les données expérimentales. Les meilleurs ajustements à  $T = 300$  K et  $T = 4$  K sont tracés dans la Figure 21. Les paramètres du modèle sont indiqués dans la légende.



**Figure 21** Courant en polarisation inverse. Les courbes en trait continu correspondent aux meilleurs ajustements réalisés avec le modèle de fuite par effet tunnel (équation Eq. 35). Les paramètres utilisés sont  $A = 1.21 \text{ mA/V}$ ,  $b = 25.0 \text{ V}^{1/2}$ ,  $V_{bi} = 1.3 \text{ V}$  à  $4 \text{ K}$  et  $A = 75.24 \text{ } \mu\text{A/V}$ ,  $b = 9.7 \text{ V}^{1/2}$  et  $V_{bi} = 1.0 \text{ V}$ .

**Tableau 2** Paramètre  $b$  et  $V_{bi}$  utilisés pour l'ajustement des courbes I-V mesurés entre  $8.9 \text{ K}$  et  $300 \text{ K}$  avec le modèle de Zener (Eq. 35).

T (K)	8.9	20	40	60	85	115	145	175	205	235	255	275	300
$b$ ( $\text{V}^{1/2}$ )	25	30	31	30	50	53	26	24	15	9,0	10	8,0	9,7
$V_{bi}$ (V)	1,3	1,9	2,2	2,5	5,6	6,2	3,6	3,7	2,3	1,1	1,2	0,7	1,0



**Figure 22 a)** Schéma de la structure de bande d'une jonction p-n polarisée en inverse illustrant le mécanisme de conduction par les défauts **b)** Modèle associé au transport tunnel par les défauts

L'ajustement à l'aide du modèle de Zener a été réalisé pour l'ensemble des courbes courant-tension mesurées à différentes températures. Les paramètres  $b$  et  $V_{bi}$  du modèle sont indiqués dans le Tableau 2. On constate que ces deux paramètres augmentent entre  $8.9 \text{ K}$  et  $115 \text{ K}$  puis diminuent au-delà de ces températures. La variation de  $V_{bi}$  est particulièrement frappante. Ce paramètre étant censé être égal au potentiel interne de la jonction, il devrait être légèrement inférieur à l'énergie de bande interdite du GaN, donc de l'ordre de  $3 \text{ V}$ . Or, ce paramètre atteint des valeurs à la fois trop

basses (0,7 V à 275 K) et trop hautes (6,2 V à 115 K, soit plus que l'énergie de bande interdite du GaN) pour qu'il représente réellement le potentiel interne de la jonction.

Pour identifier l'origine de cette anomalie, il est nécessaire de comprendre plus en détails le modèle sous-jacent à la formule de Zener. A ma connaissance, il n'existe cependant pas dans la littérature de justification théorique rigoureuse qui autorise l'emploi de la formule de Zener pour décrire le transport tunnel en présence de défauts. J'ai donc construit un modèle simple qui établit une formule équivalente à la formule de Zener, valable pour décrire les courants de fuite par effet tunnel dans une jonction p-n contenant une forte densité de défauts et polarisée en inverse. Le modèle est schématisé dans la Figure 22 et décrit plus en détails dans l'annexe I-A de ce chapitre. On suppose que les défauts créent des états localisés répartis en énergie au sein de la bande interdite. Leur densité doit être suffisante pour permettre l'existence de chemins de conduction par effet tunnel entre la bande de conduction et la bande de valence, comme schématisé dans la Figure 22a. On suppose que le transport tunnel au sein de la bande interdite nécessite  $n$  transmissions tunnel, par l'intermédiaire de  $n + 1$  états localisés que l'on numérote à l'aide d'un indice  $j$  variant entre 0 (état proche de la bande de conduction) et  $n$  (état proche de la bande de valence). On note  $N_j$  la densité d'états de rang  $j$  et  $N_j^e$  la densité d'états occupés par un électron. Un électron situé dans un état de rang  $j$  a une probabilité  $P_{j \rightarrow j-1}$  de passer par effet tunnel dans un état vide de rang  $j - 1$ . La probabilité de transfert tunnel est indépendante du sens de la transition. On a donc nécessairement  $P_{j-1 \rightarrow j} = P_{j \rightarrow j-1}$ . Afin d'alléger les notations et pour simplifier la résolution, on suppose que la probabilité  $P_{j \rightarrow j-1}$  est indépendante de  $j$ . Elle est alors notée  $P$ . Les états de rang  $n$  (resp. 0) sont connectés avec les états de la bande de valence (resp. de conduction) avec une probabilité de transfert tunnel notée  $P_{in}$  ( $P_{out}$ ). On suppose que dès qu'un électron atteint un état de la bande de conduction, il est immédiatement balayé par le champ électrique de la ZCE et n'a pas de possibilité de revenir en arrière. Comme indiqué dans la Figure 22b, on suppose donc qu'il n'y a pas de transfert tunnel de la bande de conduction vers des niveaux de défauts de rang 0. De même, lorsqu'un électron de la bande de valence est transféré par effet tunnel vers un état de rang  $n$ , il apparaît un trou dans la bande de valence. Ce trou est balayé par le champ de la jonction. Il est donc très peu probable que l'électron piégé sur le défaut puisse revenir dans la bande de valence, par manque d'état vide disponible. On suppose donc que le transfert de charge ne se fait que dans le sens « bande de valence » vers « défauts de rang  $n$  ». Les équations, développées dans l'annexe I-A, reposent sur des équations de taux et permet d'aboutir à l'équation suivante :

$$J = -e \frac{P_{out}(P/n)P_{in}R}{P_{out}(P/n) + P_{in}R[P_{out} + (P/n)]} N$$

**Eq. 43**

où  $R = N_{n+1}/N$  est le ratio entre la densité d'état de la bande valence et la densité d'état de défauts de rang  $n$ . Il est légitime de supposer  $R \gg 1$ , ce qui permet de ne garder que le deuxième terme du dénominateur. On obtient ainsi :

$$J = -e \frac{P_{out}(P/n)}{(P/n) + P_{out}} N$$

**Eq. 44**

On remarque que le courant ne dépend alors plus de  $P_{in}$ . Il est par ailleurs proportionnel à la densité de défauts  $N$  permettant le passage par effet tunnel entre la bande de valence et la bande de conduction. Elle est elle-même proportionnelle à l'écart en énergie entre le haut de la bande de conduction du côté dopé n et le bas de la bande de valence du côté dopé p (voir Figure 22a). Cet écart vaut  $eU - (E_g - V_{bi}) \approx eU$ .

Un cas limite intéressant est celui pour lequel  $P_{out} \ll P/n$  : cela signifie que le facteur limitant est l'extraction vers la bande de conduction. Dans ce cas, on a alors :

$$J \propto P_{out} U$$

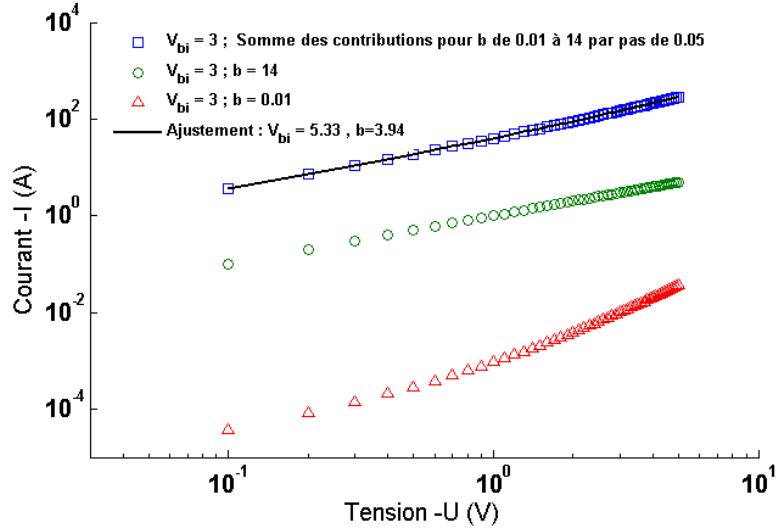
En exprimant la probabilité  $P_{out}$  en fonction de l'énergie de confinement  $E_t$  du défaut de rang 0 (écart entre l'énergie du défaut et le bord de la bande de conduction), l'équation précédente devient alors [30] :

$$J \propto U \exp\left(-\frac{\pi m_e^{\frac{1}{2}} E_t^{\frac{3}{2}}}{2\sqrt{2} q \hbar \mathcal{E}}\right)$$

**Eq. 45**

Or, le champ électrique  $\mathcal{E}$  est proportionnel à  $(V_{bi} - U)^{\frac{1}{2}}$  (voir Eq. 4). On obtient donc une expression du courant de la forme  $J = A U \exp\left(-\frac{b}{(V_{bi}-U)^{\frac{1}{2}}}\right)$ , analogue à l'équation de Zener (Eq. 25).

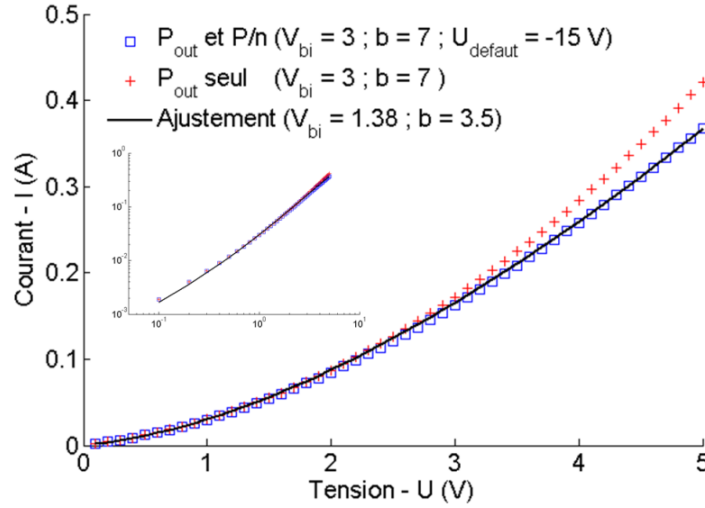
Dans le raisonnement que nous venons de faire, deux hypothèses implicites introduisent un biais dans notre conclusion. Pour écrire l'équation Eq. 45, nous avons utilisé une seule valeur pour l'énergie de confinement des défauts  $E_t$  et pour le champ électrique  $\mathcal{E}$ . Or, en réalité, plusieurs types de défauts ayant des énergies de confinement différentes peuvent être impliqués dans le courant de fuite tunnel. De même, le champ électrique n'est pas homogène au sein de la ZCE : suivant le trajet emprunté par les électrons et la position du défaut auxquels ils aboutissent avant de passer dans la bande de conduction, la valeur de  $\mathcal{E}$  varie. Ces deux effets doivent donc nous amener à considérer plusieurs canaux de conduction en parallèle, chacun de ces canaux étant modélisés par l'équation de Zener (Eq. 4) avec des valeurs différentes pour le paramètre  $b$ . Le courant tunnel total est la somme des courants traversant les différents canaux. Afin d'évaluer l'impact de ce phénomène sur la caractéristique I-V, un cas test a été simulé. Le résultat est montré dans la Figure 23. Le cas test consiste à considérer un système constitué de 280 canaux de conduction, chacun étant modélisé par l'équation de Zener. Les paramètres  $A$  et  $V_{bi}$  sont fixés arbitrairement et valent 1 et 3 pour tous les canaux. La valeur du paramètre  $b$  est différente pour chaque canal : elle varie entre 0.01 et 14 par pas de 0.05. La courbe tracée dans la Figure 23 avec des carrés bleus correspond à la caractéristique courant tension du système complet tandis que les courbes vertes (cercles) et rouge (triangles) correspondent aux caractéristiques des canaux pour lesquels le paramètre  $b$  prend ses valeurs maximales et minimales ( $b = 14$  et  $b = 0.01$  respectivement).



**Figure 23** Lorsque l'on prend en compte la distribution des valeurs d'énergie de confinement des défauts et de champ électrique dans la jonction (somme du courant issus de canaux avec des paramètres  $b$  différents), on obtient une caractéristique courant-tension qui peut être ajustée à l'aide du modèle de Zener mais dont le paramètre  $V_{bi}$  est majoré.

La courbe en trait continu noir correspond à l'ajustement de la caractéristique I-V du système complet à l'aide du modèle de Zener. On constate que l'ajustement est très bon. On remarque par ailleurs que le paramètre  $V_{bi}$ , qui vaut 5,33 V, est plus grand que celui de chacun des 280 canaux constituant le système. En raisonnant par induction, on aboutit donc à la conclusion suivante : un système constitué de plusieurs canaux de conduction parallèles modélisés par l'équation de Zener avec des paramètres  $b$  variables est équivalent à un système à un seul canal, lui-même modélisé par l'équation de Zener. Le paramètre  $V_{bi}$  du canal équivalent est plus grand que celui de ses canaux élémentaires. Cela explique donc que, lors de l'ajustement des caractéristiques I-V expérimentales, on puisse obtenir des valeurs de  $V_{bi}$  supérieures à l'énergie de bande interdite du GaN (cf. Tableau 2).

Quelle que soit la température, on devrait donc s'attendre à trouver dans le Tableau 2 des valeurs de  $V_{bi}$  toujours supérieures au potentiel interne réel de la jonction. Or, ce n'est pas le cas. Pour comprendre cela, il est nécessaire de revenir sur les conditions de validité de l'équation Eq. 45: étant donné que  $P_{out}$  est une fonction qui croît avec  $|U|$ , le critère  $P_{out} \ll P/n$  n'est plus valable au-delà d'une certaine tension. Dans ce cas, il faut utiliser l'équation de Zener corrigée (Eq. 44). Ce phénomène est illustré dans la Figure 24. La courbe représentée avec les croix rouges est obtenue en utilisant l'équation de Zener « standard » avec  $b = 7 V^{\frac{1}{2}}$  et  $V_{bi} = 3 V$ . La courbe représentée avec les carrés bleus est en revanche obtenue en utilisant l'équation de Zener corrigée pour laquelle  $U_{défaut}$  a été arbitrairement choisie égale à -15 V,  $U_{défaut}$  étant définie comme la tension pour laquelle  $\frac{P}{n} = P_{out}(U_{défaut})$ . Lorsque l'on essaie d'ajuster cette courbe avec le modèle de Zener, on constate que l'on y parvient en utilisant des paramètres  $b$  et  $V_{bi}$  inférieurs à ceux utilisés dans le calcul de  $P_{out}$  : on a ainsi  $b = 3,5 V^{\frac{1}{2}}$  et  $V_{bi} = 1,38 V$ . Cela fournit donc une explication aux valeurs anormalement basses obtenues dans le Tableau 2 : ces valeurs sont vraisemblablement obtenues lorsque la probabilité de transfert tunnel entre le défaut de rang 0 et la bande de conduction n'est pas négligeable devant la probabilité de transmission tunnel entre deux défauts localisés.



**Figure 24** Comparaison des caractéristiques I-V avec obtenues avec les équations Eq. 44 et Eq. 45: la courbe I-V obtenue lorsque l'on se place dans le cas où le transfert tunnel vers la bande de conduction n'est pas le facteur limitant peut être ajustée à partir du modèle de Zener mais conduit à des valeurs minorées de  $V_{bi}$  et  $b$ . L'encart correspond aux mêmes courbes tracées en échelle log-log.

Ces conclusions permettent de voir sous un œil nouveau la dépendance en température des paramètres  $b$  et  $V_{bi}$  présentés dans le Tableau 2. Elle pourrait témoigner de la variation du rapport  $\frac{P/n}{P_{out}}$  avec la température.  $P$  et  $P_{out}$  dépendent en effet de la température par l'intermédiaire de l'effet tunnel assisté par les phonons. Lorsque la température augmente, des phonons apparaissent, ces derniers étant répartis principalement sur les états phononiques possédant une énergie allant de 0 à quelques  $kT$  (statistique de Bose-Einstein). Un électron situé sur un état localisé peut absorber l'énergie d'un phonon et passer par effet tunnel vers un état d'énergie supérieure à son énergie initiale. Ce processus modifie donc la probabilité de transfert d'un état de rang  $j$  vers un état de rang  $j \pm 1$ , comme illustré dans la Figure 25a. De façon très qualitative, on peut s'attendre à ce que le nombre d'états vers lesquels un transfert tunnel est possible par absorption d'un phonon soit proportionnel à  $kT$ . Dans ce cas, cela nous conduit à supposer que  $P$  a une dépendance en fonction de  $T$  de la forme suivante :

$$P(T) = P_0 + P_1 kT$$

**Eq. 46**

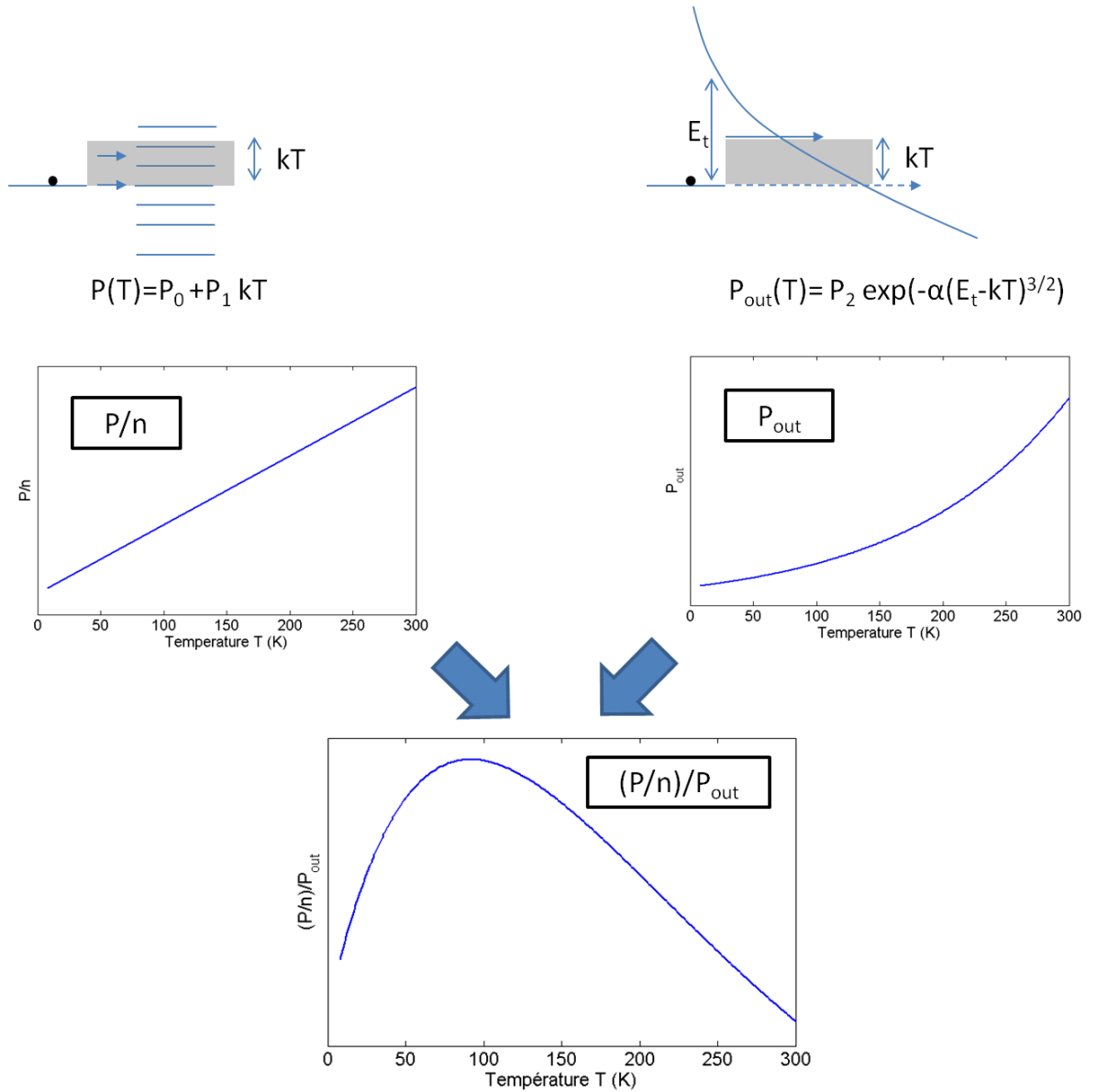
En ce qui concerne  $P_{out}$ , on peut dire que l'absorption d'un phonon d'énergie égale à  $kT$  permet d'abaisser l'énergie de la barrière tunnel de cette même quantité (cf. Figure 25b), ce qui conduit à une dépendance de  $P_{out}$  en fonction de  $T$  de la forme

$$P_{out} = P_2 \exp\left(-\alpha(E_t - kT)^{\frac{3}{2}}\right)$$

**Eq. 47**

Comme illustré dans la Figure 25c, ce type de dépendance peut alors conduire à des situations où le ratio  $\frac{P/n}{P_{out}}$  ne varie pas de façon monotone avec la température. A basse température,  $P_{out}$  est inférieure mais non négligeable par rapport à  $P/n$ . Lorsque la température augmente, la probabilité de transfert entre défauts croît initialement plus vite que la probabilité de transmission vers la bande

de conduction. On se rapproche donc du cas limite pour lequel  $P_{out} \ll P/n$ , ce qui conduit à un accroissement des paramètres  $b$  et  $V_{bi}$ . Au-delà d'une certaine température,  $P_{out}$  croît plus vite que  $P/n$  ce qui conduit à une diminution de  $b$  et  $V_{bi}$ .



**Figure 25**  $P$  et  $P_{out}$  ne dépendent pas de la même façon de la température. L'évolution du ratio  $(P/n)/P_{out}$  pourrait alors expliquer les variations des paramètres  $b$  et  $V_{bi}$  en fonction de la température.



Pour conclure ce paragraphe, on retiendra les points suivant :

- le courant observé lorsque l'on polarise en inverse le dispositif trouve son origine dans le passage, par effet tunnel assisté par les phonons, des électrons de la bande de valence vers la bande de conduction. Ce transport se fait par l'intermédiaire de défauts localisés dans la ZCE de la jonction.
- J'ai développé un modèle permettant de rendre compte de la dépendance du courant en fonction de la tension appliquée. Ce modèle aboutit à une équation similaire à l'équation de Zener, de la forme  $J = AU \exp\left(-\frac{b}{(V_{bi}-U)^{\frac{1}{2}}}\right)$ .
- La distribution des énergies de confinement des défauts et la non homogénéité du champ électrique au sein de la jonction se traduit dans l'équation précédente par une valeur du paramètre  $V_{bi}$  plus élevée que le potentiel interne de la jonction.
- Lorsque la probabilité de sortie par effet tunnel vers la bande de conduction devient du même ordre de grandeur que la probabilité de transfert entre deux états localisés ( $P_{out} \lesssim P/n$ ), cela provoque une diminution des paramètres  $b$  et  $V_{bi}$  lors de l'ajustement des caractéristiques courant-tension avec l'équation de Zener.
- La dépendance en température des caractéristiques courant-tension semble indiquer une variation non monotone du ratio  $\frac{P/n}{P_{out}}$  avec la température. Cela pourrait s'expliquer par le fait que, contrairement à  $P/n$ ,  $P_{out}$  varie de façon non linéaire avec  $T$ .

### 5.1.2 Courant en polarisation directe

Intéressons nous désormais à la caractéristique I-V en polarisation directe ( $U > 0$ ). Comme on peut le constater sur la Figure 27, la courbe courant-tension évolue de façon complexe en fonction de la température : pour des tensions comprises entre 0 et environ 2.6 V, le courant est stable ou diminue légèrement lorsque l'on abaisse la température de 300 à 205 K. Lorsque la température diminue davantage, le courant baisse fortement. Pour des tensions supérieures à environ 2.6 V, le courant augmente tout d'abord lorsque l'on diminue la température jusqu'à 205K. Mais en deçà de cette température, le courant diminue.

Comme nous l'avons vu précédemment, il existe plusieurs mécanismes de conduction possibles lorsque l'on polarise la jonction en direct. Nous avons notamment discuté la recombinaison radiative dans les puits quantiques qui conduit à une relation courant-tension de la forme  $I = I_{sat,rad} \left( \exp\left(\frac{eU}{k_B T}\right) - 1 \right)$  (équation Eq. 18), la recombinaison de type Shockley-Read-Hall pour laquelle l'équation du courant s'écrit  $I = I_{sat,SRH} \left( \exp\left(\frac{eU}{2k_B T}\right) - 1 \right)$  (Eq. 27) et le courant tunnel assisté par les défauts qui peut se mettre sous la forme  $I = I_{sat,tunnel} \left( \exp\left(\frac{eU}{E_T}\right) - 1 \right)$  (équation Eq. 33). Toutes ces équations sont de la même nature, la seule variante se trouvant dans le coefficient de l'exponentielle. Le moyen le plus évident de distinguer l'un ou l'autre des mécanismes de conduction consiste donc à extraire ce coefficient à partir des courbes I-V. Si l'on utilise la forme générique  $I = I_{sat}(\exp(\beta U) - 1)$ , on obtient  $\beta$  à l'aide de la relation suivante :

$$\beta \sim \frac{d \log(I)}{dU}$$

**Eq. 48**

Pour que cette formule soit valable il est nécessaire d'avoir  $\exp(\beta U) \gg 1$ , ce qui est valable dès que  $U$  vaut quelques  $\beta^{-1}$ . Dans notre système, il paraît évident qu'il existe plusieurs canaux de conduction en parallèle. Suivant la tension considérée, le courant passe préférentiellement dans l'un ou l'autre des canaux, ce qui devrait se traduire dans la courbe  $\beta = f(U)$  par la présence de paliers. Ceci est illustré dans la Figure 26. On considère le circuit constitué de deux diodes en parallèle comme schématisé dans la Figure 26a. Les diodes possèdent des paramètres  $\beta$  choisis arbitrairement (2.02 pour la diode 1 et 3.85 pour la diode 2). Le courant de saturation de la diode 1 est choisi plus grand que celui de la diode 2 afin qu'à faible tension, le courant dans la diode 1 soit dominant. Au-delà d'une tension de l'ordre de 6V, le courant passe en revanche majoritairement dans la diode 2, en raison de son paramètre  $\beta$  plus élevé. Cela se traduit par une rupture de pente dans la caractéristique courant – tension tracée en échelle logarithmique dans la Figure 26b. La mise en évidence de ce changement de régime de conduction est exacerbée lorsque l'on observe la fonction  $\frac{d \log(I)}{dU}$ , montrée dans la Figure 26c. Dans la région qui s'étend de 0 à environ 1 V, la fonction  $\frac{d \log(I)}{dU}$  varie rapidement. Cela traduit le fait que la tension n'est pas suffisamment grande pour que le critère  $\exp(\beta U) \gg 1$  soit vérifié.

La fonction  $\frac{d \log(I)}{dU}$  a été calculée à partir des données expérimentales. Elle est tracée pour différentes températures dans la Figure 27b. On constate que l'on n'obtient pas à proprement parler des plateaux. On observe cependant des marches. La tension à laquelle elles apparaissent et leur amplitude varient en fonction la température.

Hormis pour les trois températures les plus basses (de 8,9 à 60 K), les courbes se superposent parfaitement à faible tension, avant l'apparition de la marche n°2. Cela signifie que le paramètre  $\beta$  associé au mécanisme de conduction ne dépend pas de la température. C'est là une signature du transport tunnel. On peut donc en conclure qu'à faible tension le courant provient majoritairement du passage par effet tunnel assisté par les défauts des électrons de la bande de conduction vers la bande de valence (et réciproquement pour les trous).

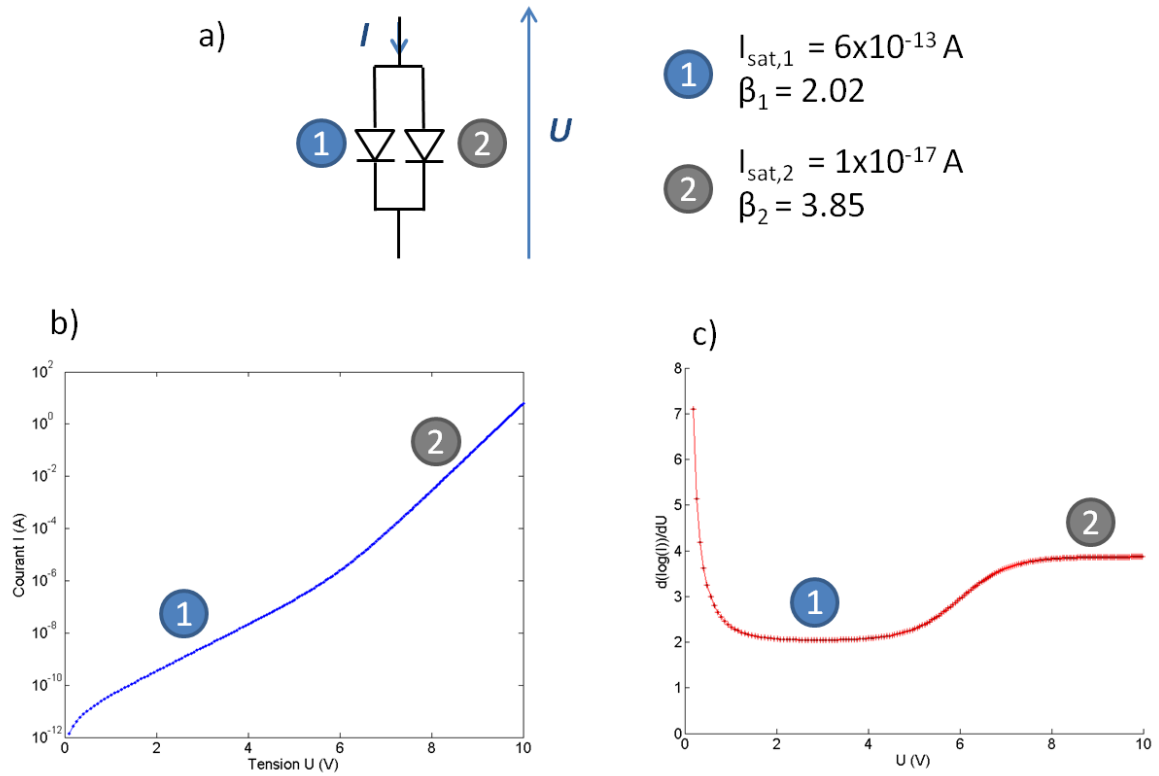


Figure 26 (b) : caractéristique courant-tension du système schématisé en (a). (c) : courbe de la fonction  $d(\log(I))/dU$  en fonction de  $U$ . La valeur atteinte au niveau du premier plateau (deuxième plateau) correspond à  $\beta_1$  (resp.  $\beta_2$ )

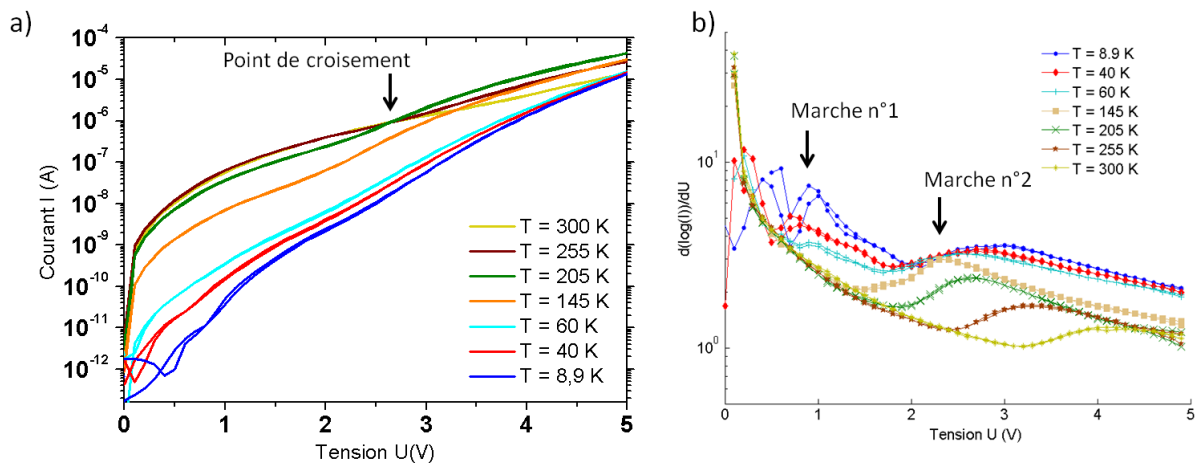
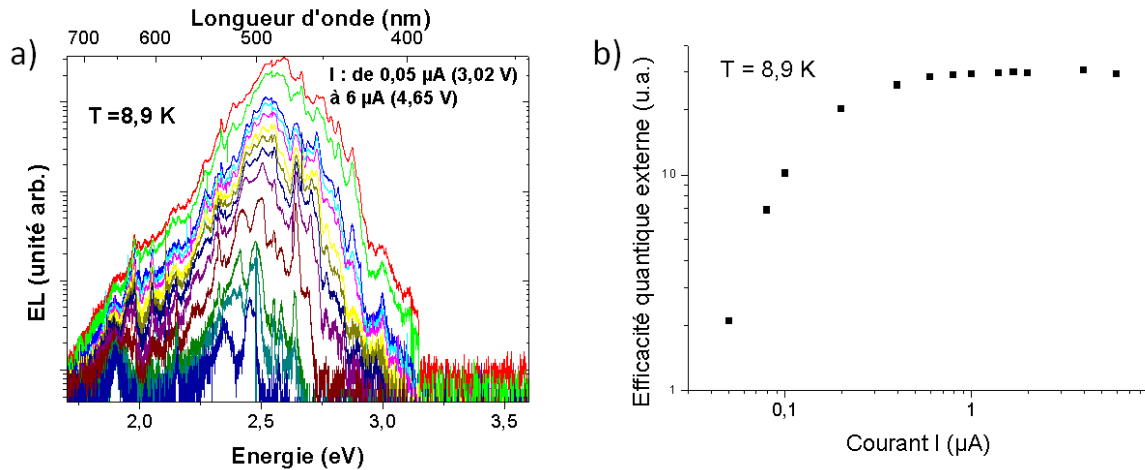


Figure 27 a) Caractéristique Courant-Tension mesurée entre 8.9K et 300 K b) Fonction  $d(\log(I))/dU$  calculé à partir des courbes I-V



**Figure 28 a) Spectres d'électroluminescence mesurés à 8,9 K entre 0,05 µA (3,02 V) et 6 µA (4,65 V) b) Efficacité quantique normalisée**

Une hypothèse pour expliquer la marche n°2, qui observée à toutes les températures, est qu'elle est associée à la recombinaison radiative dans l'InGaN qui devient dominante devant le courant tunnel. Cette marche est en effet corrélée à l'apparition d'électroluminescence dont les spectres sont présentés dans la Figure 28. Les spectres ont été mesurés à 8,9 K pour des tensions variant entre 3,02 V et 4,65 V, ce qui correspond à une gamme de courant comprise entre 0,05 µA et 6 µA. La Figure 27b correspond à l'efficacité quantique externe calculée à partir des spectres d'EL en utilisant la relation  $EQE \propto \int I_{EL}(h\nu) h\nu d(h\nu) / UI$ . La saturation de l'efficacité pour des courants supérieurs à 0,8 µA confirme que la recombinaison radiative est le mécanisme de conduction dominant jusqu'à 6 µA. Le courant n'a pas été augmenté davantage pour préserver le fil. On n'observe donc pas de chute d'efficacité à plus fort courant, qui traduirait le fait que la recombinaison Auger commence à prendre le dessus[14].

En dessous de 60K, une marche (marche n°1) dont l'amplitude dépend de la température apparaît à faible tension. Cela suggère donc qu'un nouveau mécanisme de conduction devient dominant. D'après les mesures d'électroluminescence, on peut en déduire que ce mécanisme est associé à un processus de recombinaison non radiative. Sa nature exacte n'est pas claire. On peut par exemple penser à une recombinaison de type Shockley-Read-Hall.

Avant de revenir sur les courbes I-V, il y a quelques caractéristiques notables à relever dans les spectres d'électroluminescence. On constate tout d'abord que l'électroluminescence couvre une large gamme spectrale, de 1,8 à 3,2 eV, en accord avec les mesures de microPL présentée précédemment. De façon générale, un décalage de l'énergie moyenne de l'électroluminescence vers les hautes énergies est observé lorsque le courant augmente. Ce décalage peut être attribué au phénomène de remplissage des bandes (*band filling*). Les spectres présentent une forte structuration, avec la présence de pics, particulièrement visibles à faible injection. Ces pics sont reproductibles d'un spectre à l'autre et témoignent vraisemblablement de la ségrégation de l'indium au sein du segment large d'InGaN : les zones plus riches en indium créent des minima de potentiel locaux qui piègent les porteurs à basse température.

Intéressons nous désormais plus en détails à l'évolution du courant en fonction de la température dans le régime où la recombinaison radiative devient dominante. On constate sur la Figure 27 que les

courbes courant-tension pour des températures entre 205 et 300 K se croisent quasiment en un même point à une tension de l'ordre de 2.6 V. Pour comprendre cela, il faut revenir à l'équation de la diode (Eq. 18). Nous avons vu que le courant est proportionnel à  $\exp\left(\frac{eU}{k_B T}\right)$ . Ainsi, plus la température est basse, plus le courant augmente rapidement en fonction de la tension appliquée. Cela s'explique par le fait que la distribution de Fermi-Dirac des porteurs de charge varie de façon plus abrupte à basse température : la variation relative de la densité de porteurs dans les puits quantiques, provoquée par un petit déplacement des quasi-niveaux de Fermi, est donc plus importante à basse température. D'après les équations Eq. 19, Eq. 20 et Eq. 21, on note par ailleurs que  $I_{sat} \propto T E_{g,InGaN} \exp\left(\frac{-E_{g,InGaN}}{k_B T}\right)$ . On a donc :

$$I \propto T E_{g,InGaN} \exp\left(\frac{-E_{g,InGaN}}{k_B T}\right) \left(\exp\left(\frac{eU}{k_B T}\right) - 1\right)$$

**Eq. 49**

Cette relation est tracée dans la Figure 29 en choisissant  $E_{g,InGaN} = 2.6 \text{ eV}$  pour des températures variant entre 50 et 300 K. Le courant est en unité arbitraire. On constate que les courbes se coupent quasiment au même point, autour d'une tension  $U_0$  telle que

$$U_0 \approx \frac{E_{g,InGaN}}{e}$$

**Eq. 50**

En fait, si l'on néglige la dépendance en température de la densité d'états joints  $N_j$ , les courbes se coupent exactement en  $U_0 = E_{g,PQ}/e$ . En effet, cette hypothèse conduit à la disparition<sup>5</sup> du facteur  $T$  dans l'équation Eq. 49. La condition d'intersection de deux courbes  $U$ - $I$  correspondant à des températures  $T_1 \neq T_2$  s'écrit alors simplement<sup>6</sup> :

$$\exp\left(\frac{eU_0 - E_{g,InGaN}}{k_B} \left[\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right]\right) = 1$$

**Eq. 51**

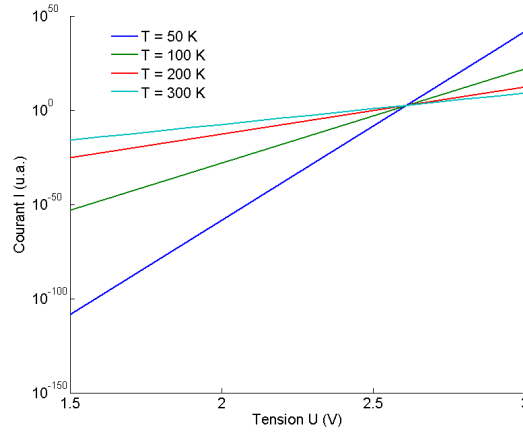
qui n'est vérifiée que si  $eU_0 - E_{g,PQ} = 0$ .

La position du point d'intersection des courbes  $I$ - $V$  est donc en accord avec la prédiction du modèle donnée par l'équation Eq. 50. La non-intersection des courbes associées aux températures inférieures à 205 K provient vraisemblablement du fait que le courant tunnel, encore non négligeable devant le courant de recombinaison radiative dans cette région, varie fortement avec  $T$  sur cette gamme de température, ce qui décale verticalement les courbes.

Un point que nous n'avons pas encore discuté est le fait que les courbes  $\frac{d(\log(I))}{dU}$  dans la Figure 27 ne présentent pas de plateau : en dehors des zones de transitions entre les différents régimes de conduction (marche), les courbes sont décroissantes au lieu d'être constantes. Nous avons vu

<sup>5</sup> La densité d'état dans un puits quantiques (cas 2D) est proportionnelle à  $T$  et non  $T^{3/2}$  (cas 3D).

<sup>6</sup> On utilise également le fait que  $\exp\left(\frac{eU}{k_B T}\right) \gg 1$



**Figure 29** Caractéristique tension-courant d'une diode en fonction de la température d'après l'équation Eq. 52

précédemment que cette tendance peut s'observer à faible tension lorsque la condition  $\exp(\beta U) \gg 1$  n'est pas respectée. Cette explication semble peu probable dans notre cas : si cette explication était correcte, la décroissance devrait s'interrompre une fois la transition vers un nouveau mode de conduction effectuée. Il est plus vraisemblable que la décroissance observée provienne de la concentration du courant au niveau du contact p en raison de la résistance élevée de la coquille de p-GaN. Ce phénomène est illustré dans la Figure 30. J'ai pour cela modélisé un nanofil par le circuit équivalent montré dans la Figure 30a. Ce modèle est détaillé dans l'annexe II-A du chapitre 2. Le nanofil est découpé le long de son axe en 100 cellules élémentaires. La jonction dans chacune de ces cellules est modélisée par une diode paramétrée par son courant de saturation  $I_{sat}$  et le paramètre  $\beta$  (coefficient de l'exponentielle). La région sous le contact représente 10 des 100 cellules et est situé à l'extrémité du système. Au niveau du contact, le courant traverse radialement la coquille de p-GaN. Cette dernière est donc modélisée par une résistance en série  $R_{serie}$ . En dehors du contact, le courant parcourt la coquille le long de l'axe du fil avant de se redistribuer dans les diodes. La coquille est donc modélisée ici par une résistance  $R_{coquille}$ . A proximité du contact, le courant ne passe pas brutalement d'un transport parfaitement radial à un transport entièrement axial. Ceci est pris en compte en ajoutant une résistance en série dont la valeur décroît à mesure que l'on s'éloigne du contact et qui tend vers 0 à l'infini. La façon dont décroît cette résistance rend compte l'épaisseur de la coquille ainsi que la longueur des cellules élémentaires dans la direction axiale. Pour cet exemple, on suppose que la résistance du cœur de n-GaN est négligeable devant celle de la coquille. Les paramètres utilisés sont indiqués dans la légende de la Figure 30. La caractéristique courant-tension obtenue avec ce système est montré dans la Figure 30b. Etant donné que le courant varie sur presque six ordres de grandeur, il est peu aisé de visualiser le phénomène de concentration du courant si l'on trace simplement le courant par cellule. J'ai donc représenté dans la Figure 30c le courant traversant chaque cellule élémentaire en le normalisant par le courant total injecté dans le fil. L'axe de droite correspond à la position le long du nanofil, le contact étant situé entre les positions 0 et 10. L'autre axe correspond à la tension appliquée. On constate que pour de faibles tensions, le courant se distribue de façon homogène le long du fil, chacune des 100 cellules recevant 1/100 du courant total. Cependant, lorsque la tension augmente, la chute de potentiel le long de la coquille devient non négligeable, ce qui fait que le courant traverse la jonction en passant préférentiellement sous le contact : les 10 cellules sous le contact reçoivent alors chacune environ 1/10 du courant total.

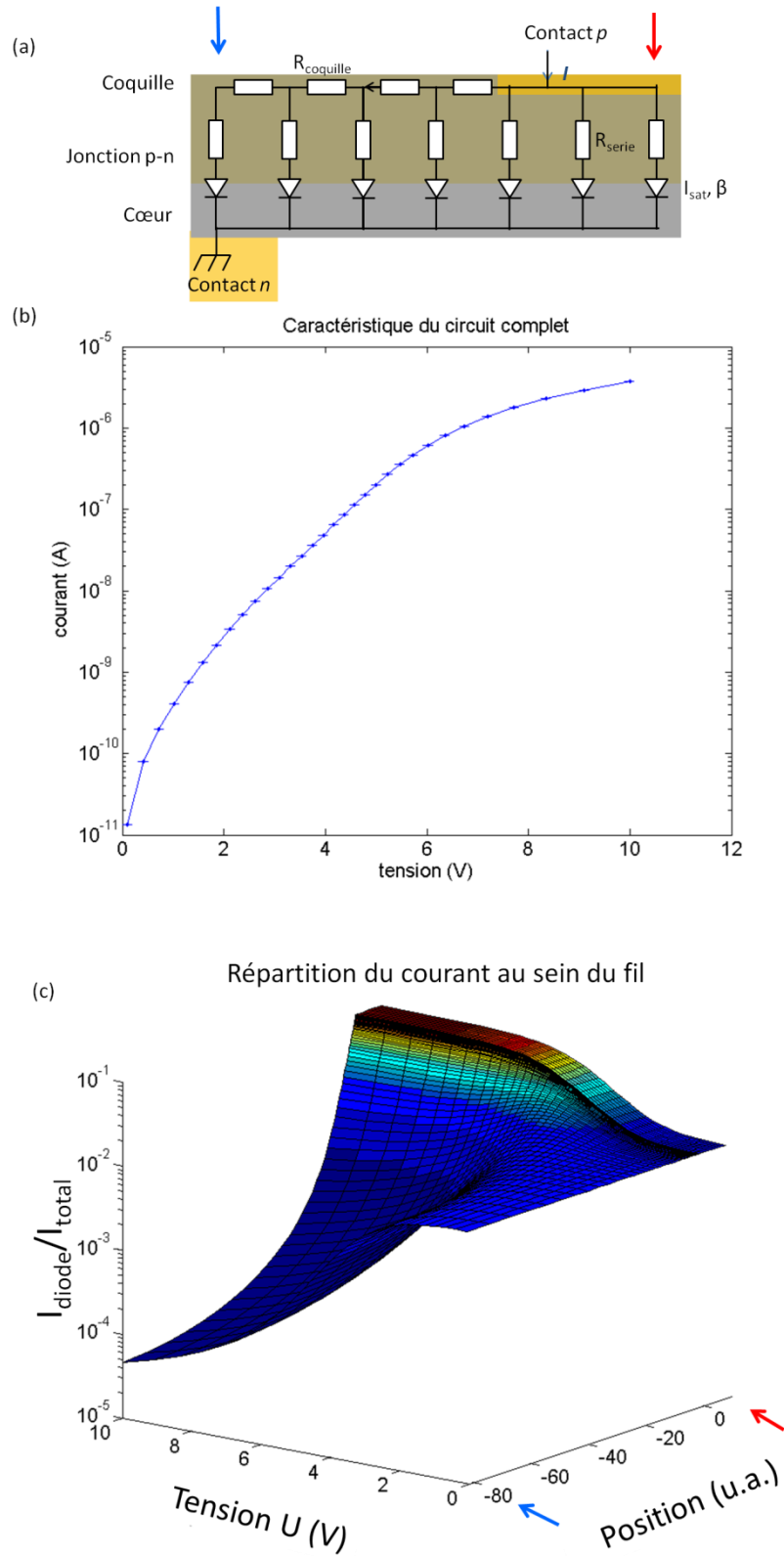
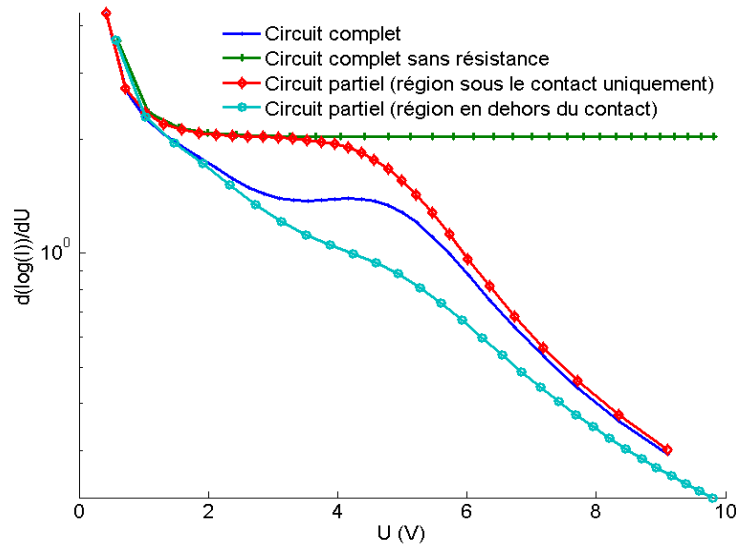


Figure 30 a) Schéma électrique équivalent utilisé pour modéliser le nanofil. Ce dernier est divisé en 100 cellules élémentaires dont 10 représentent la région du contact. Les paramètres utilisés dans les cellules sont les suivants :  $R_{\text{serie}} = 1.25 \times 10^7 \Omega$ ,  $R_{\text{coquille}} = 1.79 \times 10^6 \Omega$ ,  $I_{\text{sat}} = 6 \times 10^{-13} \text{ A}$ ,  $\beta = 2.02$ . b) Caractéristique courant-tension du système c) Répartition du courant le long du nanofil en fonction de la tension appliquée. La grandeur représentée est obtenue en calculant, pour chaque tension  $U$  calculée, le rapport entre le courant traversant les cellules élémentaires et le courant total injecté dans le nanofil. A faible tension, le courant injecté se répartit dans l'ensemble du nanofil tandis qu'à forte tension, le courant injecté traverse la jonction sous le contact p.



**Figure 31** La courbe bleue correspond à la fonction  $d(\log(I))/dU$  calculée à partir de la caractéristique montrée dans la Figure 30. Afin d'identifier l'influence des résistances  $R_{coquille}$  et  $R_{serie}$  les mêmes courbes calculées en ne prenant en compte qu'une partie du circuit sont également tracées. La courbe verte représente le cas où il n'y a pas de résistance : la fonction  $d(\log(I))/dU$  converge alors vers le paramètre  $\beta$ .

La fonction  $d(\log(I))/dU$  obtenue à partir de la caractéristique simulée est montrée dans la Figure 31 (courbe bleue). On constate que la fonction est décroissante jusqu'à environ 3,5 V puis remonte légèrement jusqu'à 6 V et décroît de nouveau jusqu'à 10 V. Le plateau que l'on obtiendrait en l'absence de toute résistance (courbe verte) n'est jamais atteint. Pour comprendre les différentes parties de la courbe, les courbes obtenues avec les circuits partiels constitués uniquement de la région sous le contact ou uniquement de la région en dehors du contact ont également été tracées. On constate que la décroissance à faible tension est due au phénomène de concentration de courant. En revanche, pour les tensions plus élevées, on constate qu'à mesure que le courant injecté dans la région en dehors du contact devient de moins en moins significatif, la courbe du circuit complet se rapproche de celle obtenue en ne considérant que la région sous le contact. La décroissance observée au-delà de 5 V provient alors de l'effet de la résistance en série<sup>7</sup>.

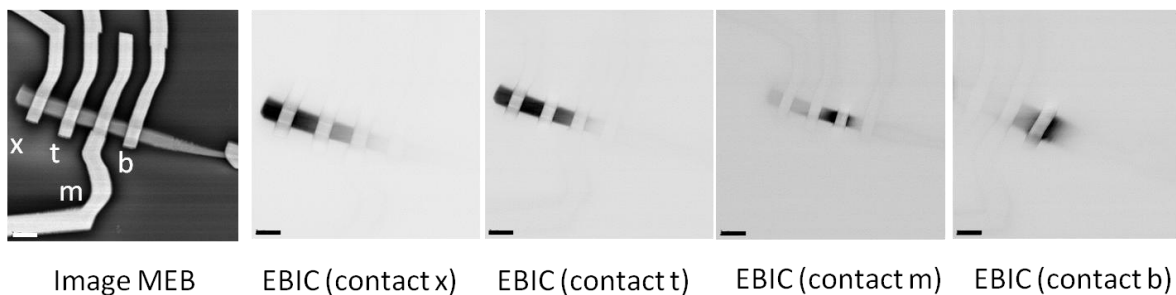
On voit donc que l'on peut émettre une deuxième hypothèse pour expliquer la deuxième marche observée dans les courbes expérimentales : cela peut provenir du phénomène de concentration de courant au niveau du contact combiné à l'influence de la résistance en série sous le contact. Cette hypothèse suppose que la coquille soit assez résistive pour que le phénomène de concentration de courant se produise à faible voltage. Pour vérifier cela, j'ai réalisé des mesures EBIC (*Electron Beam Induced Current*) sur ce nanofils. La cartographie EBIC est présentée dans la Figure 32. L'analyse des mesures EBIC sera détaillée dans le chapitre 2 mais une analyse simple nous suffit ici. L'image de gauche est obtenue par imagerie MEB à partir du signal des électrons secondaires. Les distorsions sont causées par les effets de charge. Les quatre autres images correspondent aux cartographies EBIC obtenue en utilisant l'un des quatre contacts sur la coquille et le contact n. Elles ont été mesurées à une tension d'accélération de 15 kV. Les zones sombres correspondent aux régions, qui

<sup>7</sup> Il est intéressant de remarquer que la marche qui précède la deuxième décroissance sera d'autant plus marquée que la coquille dopée p est peu épaisse : la résistance  $R_{serie}$  est en effet proportionnelle à l'épaisseur tandis que la résistance  $R_{coquille}$  en dépend de façon inversement proportionnelle.



quand elles sont excités par le faisceau, génèrent un courant qui est collecté par les contacts. Les quatre cartographies nous indiquent que l'ensemble de la jonction est susceptible de générer du courant. Cependant, seule une partie de ce courant est collecté par les contacts, en raison de la résistance de la coquille. Le contact que j'ai utilisé pour cette étude est le contact « b ». Le courant total généré par la jonction est estimé à quelques centaines de nano-ampères, ce qui correspond au courant que l'on injecte lorsque l'on polarise le dispositif avec une tension de l'ordre de 1,5 V. La cartographie EBIC montre que dans ces conditions la redistribution du courant est déjà très significative, la zone de collecte étant limitée à quelques microns de part et d'autre du contact. Ce résultat conforte donc la validité de l'hypothèse de la concentration du courant au niveau du contact pour expliquer les courbes  $d(\log(I))/dU$  mesurées.

A ce stade, il est donc difficile de trancher en faveur de l'une ou de l'autre des hypothèses.

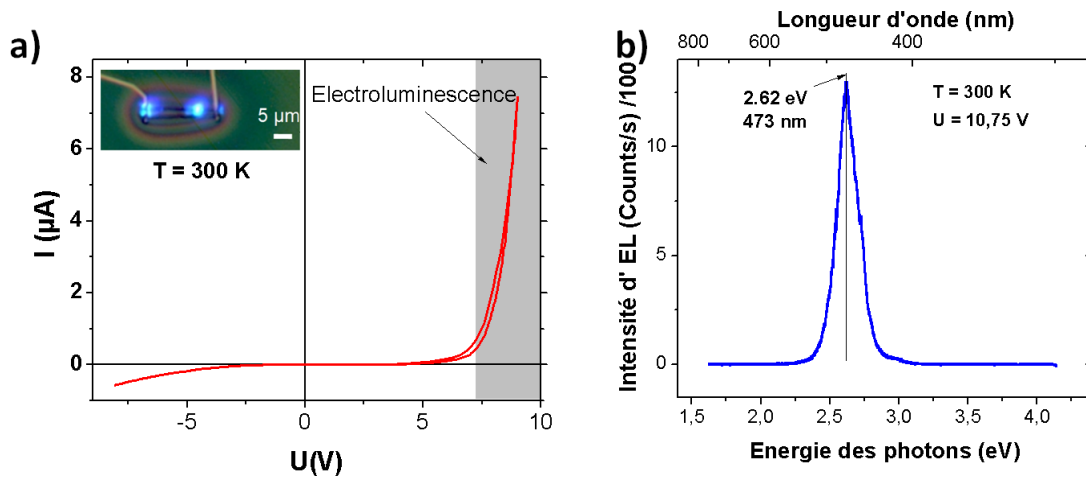


**Figure 32** Image MEB et cartographies EBIC obtenues en utilisant le contact n et un des quatre contacts p. Les traits dans le coin gauche en bas des images correspondent à une longueur de 2  $\mu\text{m}$ .

Pour conclure, nous pouvons résumer les points importants de ce paragraphe :

- L'analyse des caractéristiques courant-tension en fonction de la température met en évidence l'existence de plusieurs mécanismes de conduction lorsque l'on polarise la jonction en direct.
- A faible tension et pour des températures supérieures à 60 K, le mécanisme de conduction dominant est le transport tunnel assisté par les défauts.
- En dessous de 60 K, un nouveau mécanisme devient dominant à faible tension. Ce mécanisme est non radiatif et est caractérisé par un facteur  $\beta$  (équation Eq. 48) qui dépend de la température. La nature de ce mécanisme n'est pas clairement identifiée. On peut penser par exemple à une recombinaison de type Shockley-Read-Hall.
- Pour des tensions au-delà de 3 V à 8.9 K, le mécanisme dominant devient la recombinaison radiative dans le segment d'InGaN. La domination progressive de ce mécanisme pourrait expliquer la marche observée sur toutes les courbes  $d(\log(I))/dU$  en fonction de la température.
- L'analyse des courbes  $d(\log(I))/dU$  met en évidence le phénomène de concentration du courant à proximité du contact, dû à la résistance de la coquille. Ce phénomène combiné à l'effet de la résistance de la coquille sous le contact (qui crée une résistance en série avec la jonction) pourrait également expliquer la marche observée sur les courbes  $(\log(I))/dU$ .

## 5.2 Hétérostructure à puits quantiques



**Figure 33 a) Caractéristique Courant – Tension d'un fil de l'échantillon à plus faible taux d'indium mesurée à température ambiante sous air. L'encart est une photographie du fil qui émet de la lumière bleue lorsqu'il est soumis à une tension d'environ 10 V. On remarque qu'en raison de l'effet de guide d'onde du fil, la lumière est observée principalement aux deux extrémités du fil et au milieu du fil dans la région où la coquille s'interrompt. b) Spectre d'électroluminescence caractéristique d'un fil de l'échantillon à plus faible taux d'indium mesuré à température ambiante pour une tension de 10.75 V.**

Cette section porte sur l'étude de nanofils possédant une hétérostructure à puits quantiques. Je me suis focalisé sur l'étude des spectres d'électroluminescence qui m'ont permis de mettre en évidence l'influence de la présence de deux types de puits quantiques (radiaux et axiaux) sur la distribution du courant dans le nanofil.

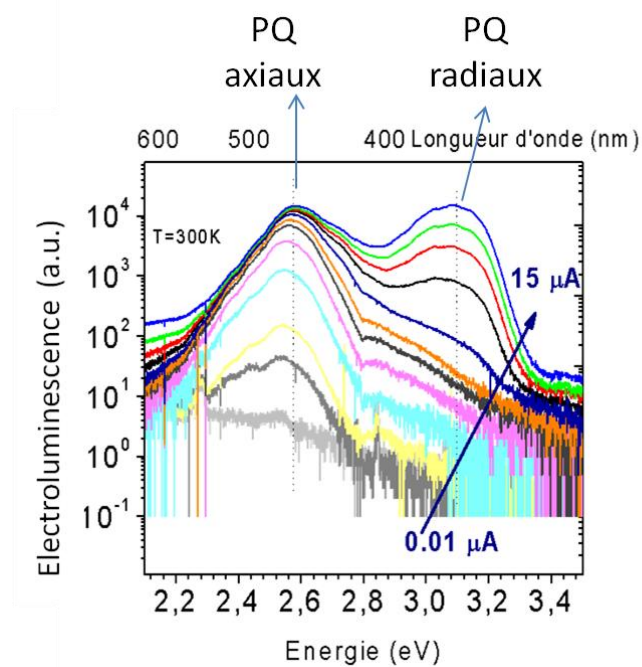
### 5.2.1 Mesures à température ambiante en fonction de la tension appliquée

La caractéristique courant – tension  $I(V)$  des nanofils a été mesurée à température ambiante sous air dans une station sous pointe à l'aide d'une source-mètre à faible bruit Keithley 2636. Une caractéristique représentative des dispositifs étudiés est présentée dans la Figure 33a. Elle a été mesurée sur un fil provenant de l'échantillon T1163 (échantillon à plus faible taux d'indium). On observe que le courant est inférieur à  $0.1 \mu A$  lorsque la tension est inférieure à 5 V puis qu'il augmente rapidement au-delà. Ce comportement est qualitativement conforme à celui attendu d'après les modèles présentés en première partie. Lorsque l'on polarise la diode en inverse ( $U = -U_0 < 0 V$ ), on constate toutefois que le courant n'est pas négligeable devant le courant observé en  $U = +U_0$ . Ce courant de fuite provient d'un transport tunnel assisté par les défauts comme dans le cas de l'échantillon à segment large.

Lorsque des courants de l'ordre de  $1 \mu A$  sont injectés dans le fil, on commence à observer de l'électroluminescence de couleur bleue. Un spectre d'électroluminescence mesuré à température ambiante sur un fil de l'échantillon le moins riche en indium polarisé avec une tension de 10.75 V est montré dans la Figure 33b. Le spectre contient un unique pic centré à 473 nm (2.62 eV). L'encart de la Figure 33a montre une photographie du fil lorsqu'il est polarisé avec une tension de l'ordre de 10 V. Sur cette image, le contact sur la coquille est situé sur la gauche tandis que le contact de droite recouvre la base du fil constituée de  $n^{++}\text{-GaIn}$ . On remarque l'effet « guide d'onde » dans le fil : la lumière perçue provient principalement des extrémités et du milieu du fil à l'endroit où s'interrompt la coquille. La tension nécessaire pour commencer à voir l'électroluminescence est d'environ 7 V, soit un peu plus de deux fois le potentiel interne (*built-in*) de la jonction p-n. Cette valeur anormalement

élevée peut avoir plusieurs origines. Tout d'abord, le contact sur la coquille p n'est pas parfaitement ohmique, comme cela a été mis en évidence lors des mesures EBIC présentées dans le chapitre précédent. Une chute de potentiel se produit donc à l'interface entre le métal et la coquille. Par ailleurs, la résistivité de la coquille causée par le faible dopage du GaN dopé p et par la faible mobilité des trous peut également conduire à une chute de potentiel entre le contact p et la région active. Enfin, le fait que le GaN soit un semi-conducteur à grande énergie de bande interdite et que la coquille soit faiblement dopée font que la ZCE de la jonction p-n s'étend sur plusieurs centaines de nanomètres, ce qui n'est pas négligeable devant la longueur de diffusion des porteurs minoritaires. Cela favorise la recombinaison non radiative des porteurs de charges au sein de la ZCE et peut donc nuire à l'efficacité d'injection de ces derniers dans la région active.

Intéressons nous désormais à l'évolution du spectre d'EL lorsque le courant d'injection varie. La Figure 34 montre les spectres d'EL pour différents courants à température ambiante sur un fil de l'échantillon à plus faible taux d'indium. On remarque qu'à faible courant d'injection, une première contribution spectrale à basse énergie est présente. Puis à mesure que le courant augmente, son intensité s'accroît puis sature tandis qu'une nouvelle contribution à plus haute énergie apparaît et prend une importance relative de plus en plus grande jusqu'à devenir dominante.



**Figure 34 Spectres d'EL mesurés à température ambiante pour différents courants d'injection sur un nanofil de l'échantillon le plus pauvre indium. A faible injection, les spectres ne contiennent qu'un seul pic. Lorsque le courant augmente un pic à haute énergie apparaît.**

Comme illustré dans Figure 35, le même phénomène est observable dans les trois échantillons avec des taux d'indium différents (T1165, T1164 et T1163), bien que légèrement moins évident à distinguer sur T1165 en raison de la proximité des pics et de la faible intensité du pic à basse énergie.

On remarque par ailleurs que l'augmentation du taux d'indium entre les échantillons induit un décalage vers les basses énergies de chacune de ces contributions, conformément à ce qui est attendu. Pour comprendre l'origine de ces deux contributions, les mesures de CL sont précieuses. Ces mesures réalisées sur l'échantillon 3 (à taux d'indium le plus faible) ont mis en évidence que les puits

radiaux émettent entre 3.0 et 3.3 eV alors que les puits axiaux émettent à plus basse énergie entre 2.55 et 2.75 eV. Les mesures d'EL indiquent donc qu'il existe deux régimes: en régime de faible injection, les porteurs de charges se recombinent principalement dans les puits axiaux. En régime de forte injection, ils tendent au contraire à se recombiner majoritairement dans les puits radiaux.

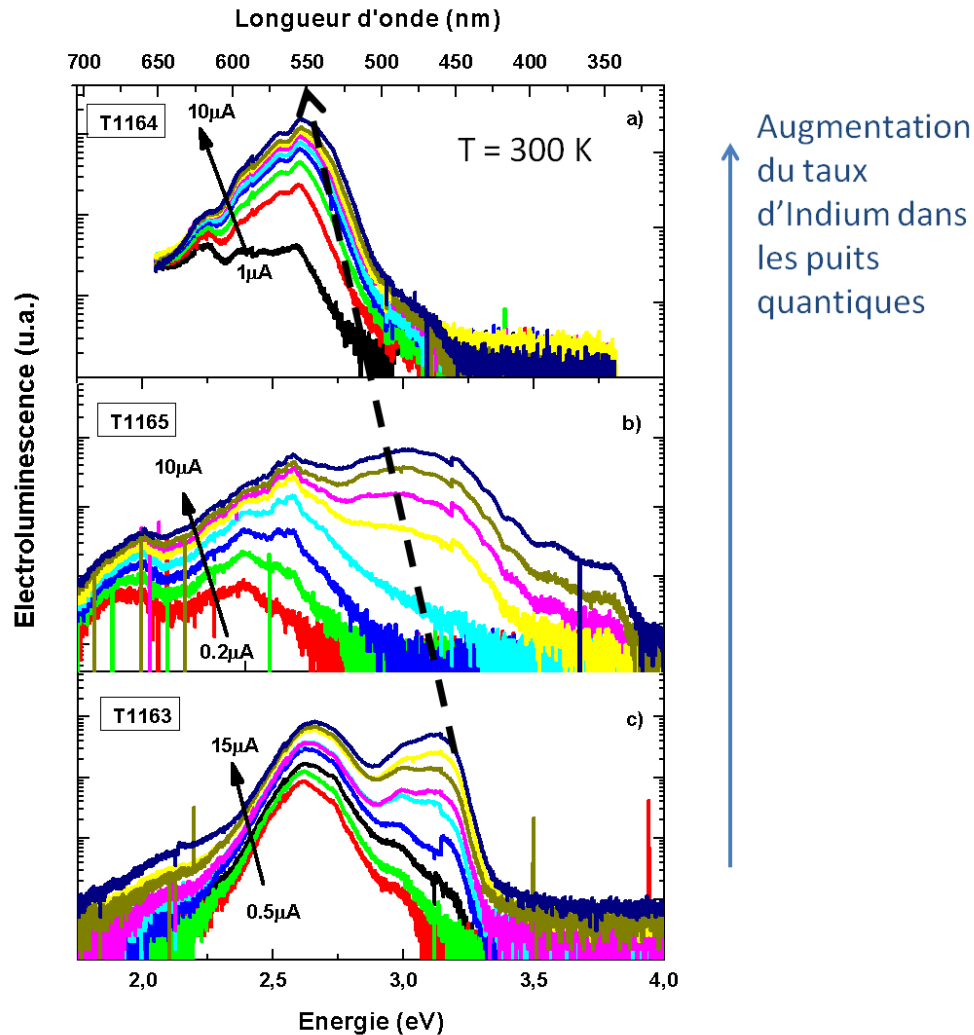


Figure 35 Spectres d'EL mesurés à température ambiante pour différents courants d'injection sur des nanofils des échantillons du plus riche en indium au plus pauvre de a) à c).

### 5.2.2 Comportement de l'EL en fonction de la température

Afin de comprendre plus en détails le mécanisme à l'origine du phénomène observé, une étude en température entre 4 K et 300 K a été menée sur l'échantillon 3. Les résultats de cette étude sont présentés dans la Figure 36. On y voit les spectres d'EL normalisés pour différentes températures. Ils sont décalés suivant l'axe vertical afin de rendre le graphique plus lisible. Les spectres ont été mesurés avec une tension appliquée de 9 V, pour laquelle on observe uniquement la luminescence des puits axiaux à 300 K. Lorsque la température diminue, on constate que le pic associé aux puits radiaux apparaît et devient de plus en plus présent. En revanche, la contribution des puits axiaux s'amenuise et disparaît presque totalement à 4 K.

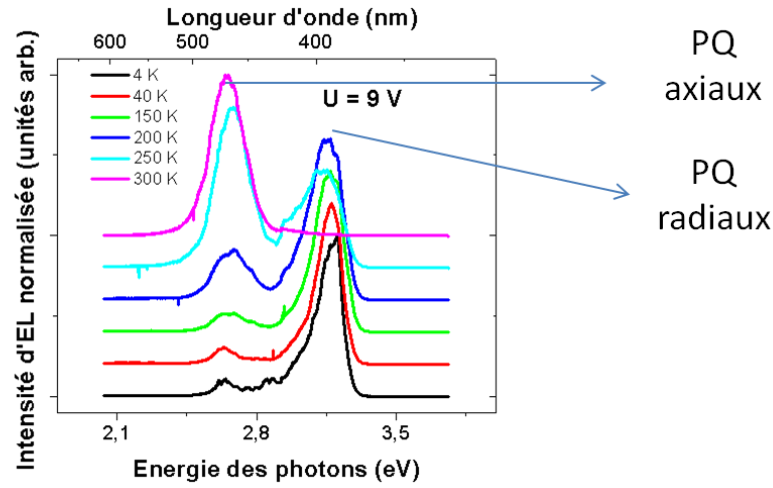


Figure 36 Spectres d'EL normalisés mesurés pour une tension de 9 V en fonction de la température entre 4 K et 300 K.

Deux mécanismes peuvent être envisagés pour expliquer ces observations : on peut tout d'abord supposer que le ratio entre les courants injectés dans les puits axiaux et dans les puits radiaux varie en fonction de la tension appliquée et de la température : pour de faibles courants et à haute température, l'injection se fait principalement dans les puits axiaux, tandis que pour de forts courants et à basse température, l'injection se fait principalement sous le contact p dans les puits radiaux. L'autre mécanisme possible est lié au transport des porteurs dans les puits, vers les régions de moindre potentiel (c'est-à-dire les régions les plus riches en indium). Le comportement observé en fonction de la tension appliquée peut alors s'interpréter comme un effet de remplissage de bande (*band filling*) à l'échelle de tout le puits. L'amoindrissement du pic d'EL de basse énergie lorsque l'échantillon est refroidi provient alors de la diminution de la longueur moyenne parcourue par les porteurs de charges dans les puits avant qu'ils se recombinent.

Analysons plus en détails ces deux mécanismes.

### 5.2.3 Modèle fondé sur l'inhomogénéité d'injection dans les puits quantiques

Pour comprendre les inhomogénéités d'injection, il est nécessaire de se référer à la caractéristique courant-tension de la diode présentée dans la première section. Lorsque l'on néglige les recombinaisons non radiatives (SRH et Auger), la densité de courant parcourant la jonction s'écrit d'après l'équation Eq. 18 :

$$J = J_{\text{sat}} \left( \exp \left( \frac{eU}{k_B T} \right) - 1 \right) \quad \text{avec} \quad J_{\text{sat}} = e \frac{N_j}{\tau_R} \exp \left( -\frac{E_{g,PQ}}{k_B T} \right) d_{PQ}.$$

Eq. 52

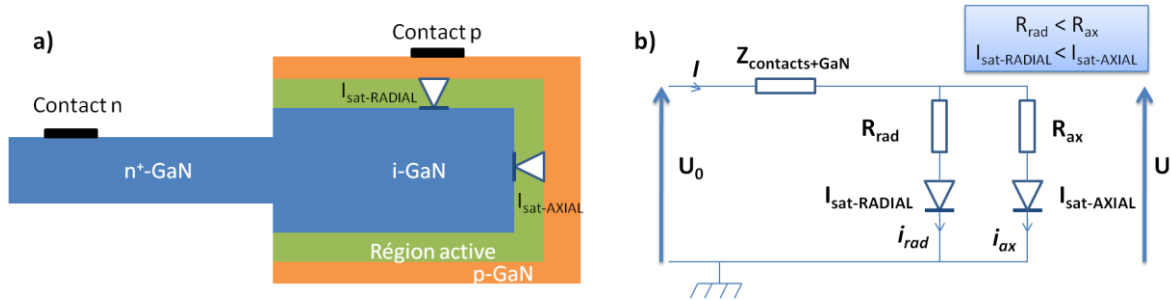
D'après les équations Eq. 20 et Eq. 21,  $N_j$  et  $\tau_R$  ne dépendent que faiblement du taux d'indium dans les puits. L'équation Eq. 52 suggère donc que le rapport entre les densités de courant injectées dans les puits quantiques axiaux et radiaux  $J_{PQ\text{-axiaux}}/J_{PQ\text{-radiaux}}$  est donc de l'ordre de  $\exp \left( \frac{E_{g-PQR} - E_{g-PQA}}{k_B T} \right)$  où  $E_{g-PQR}$  et  $E_{g-PQA}$  sont les énergies de bandes interdites de l'InGaIn pour les puits radiaux et axiaux respectivement. Le Tableau 3 indique le rapport  $J_{PQ\text{-axiaux}}/J_{PQ\text{-radiaux}}$

calculé en estimant  $E_{g-PQR}$  et  $E_{g-PQA}$  à partir de la position des pics d'EL dans les spectres de la Figure 35. On constate donc que la densité de courant dans les puits axiaux peut être entre  $10^3$  et  $10^8$  fois plus importante que la densité de courant dans les puits radiaux suivant les échantillons considérés.

**Tableau 3** Position en énergie des pics d'EL pour les trois échantillons, d'après la Figure 35 et calcul du rapport entre les densités de courant dans les diodes axiales et radiales, d'après l'équation Eq. 52 . Les positions des pics sont mesurées pour le courant le plus élevé.

Echantillon	Position du pic d'EL à basse énergie (eV)	Position du pic d'EL à haute énergie (eV)	$J_{PQ\text{ axiaux}}/J_{PQ\text{ radiaux}}$
T1164 (fort taux d'In)	2,38	2,60	$6,6 \times 10^3$
T1165	2,61	2,90	$1,1 \times 10^5$
T1163 (faible taux d'In)	2,66	3,14	$2,2 \times 10^8$

L'équation Eq. 52 explique donc bien le comportement à faible injection observé dans les mesures à température ambiante. Cependant lorsque le courant augmente, la chute de potentiel dans les régions neutres n'est plus négligeable. Le système devient alors équivalent à celui schématisé dans la Figure 37. Les jonctions axiales et radiales sont représentées par deux diodes dont les courants de saturation  $I_{sat-RADIAL}$  et  $I_{sat-AXIAL}$  valent respectivement  $J_{sat-radial}S_{radial}$  et  $J_{sat-axial}S_{axial}$  où les grandeurs  $S$  correspondent aux surfaces effectives des jonctions. On s'attend à ce que l'intensité de l'EL émise par chacune des jonctions soit proportionnelle au courant qui les traverse.



**Figure 37 a)** Schéma du nanofil (vue en coupe longitudinale) avec deux diodes représentant les jonctions radiales et axiales. **b)** Schéma électrique équivalent du nanofil

Si l'on prend en compte l'intégralité de la jonction radiale, on remarque que la surface effective  $S_{radial} \sim 45 \mu m^2$  est environ un ordre de grandeur plus grande que celle des puits axiaux  $S_{axial} \sim 0.65 \mu m^2$ . Cependant au vu du ratio  $J_{PQ-axiaux}/J_{PQ-radiaux}$  indiqué dans le Tableau 3, nous avons tout de même  $I_{sat-radial} < I_{sat-axial}$ . Les deux diodes sont chacune en série avec une résistance qui prend en compte la résistivité des régions neutres entre le contact p et le cœur de n-GaN. Le trajet du courant dans la coquille et dans le cœur en n-i-d GaN est plus long lorsque l'on considère l'injection dans les puits axiaux. La résistance  $R_{ax}$  en série avec la diode axiale est donc plus grande que la résistance en série avec la diode radiale  $R_{rad}$ . L'impédance  $Z_{contacts+GaN}$  prend en compte la résistance du contact (et son éventuelle non-linéarité) ainsi que la résistance du GaN sur la portion commune des deux trajets. Cette impédance n'a pas d'impact sur la façon donc le courant se répartit entre les jonctions axiale et radiale : en sa présence, pour un même courant injecté  $I$ , la tension  $U_0$  à appliquer aux bornes du système est simplement plus élevée:  $U_0 = U + Z_{contacts+GaN}I$ . On peut donc raisonner sans prendre en compte cette impédance. Lorsque qu'une tension  $U$  est appliquée, les courant  $i_{rad}$  et  $i_{ax}$  qui traversent les jonctions radiales et axiales

vérifient les équations suivantes (obtenue en renversant l'équation Eq. 52 et en prenant en compte les résistances) :

$$\begin{cases} U = \frac{k_B T}{e} \ln \left( 1 + \frac{i_{rad}}{I_{sat-radial}} \right) + R_{rad} i_{rad} \\ U = \frac{k_B T}{e} \ln \left( 1 + \frac{i_{ax}}{I_{sat-axial}} \right) + R_{ax} i_{ax} \end{cases}$$

Eq. 53

Malheureusement, on ne peut pas inverser ces équations pour obtenir la fonction  $i(U)$  (l'équation à résoudre est transcendante). Il est par ailleurs commode de travailler sur une équation équivalente adimensionnée. On définit donc les grandeurs adimensionnelles  $\tilde{U}$ ,  $\tilde{i}$  et  $\tilde{R}$  qui sont reliées aux grandeurs dimensionnées (tension  $U$ , courant  $i$  et résistance  $R$ ) par les équations  $\tilde{U} = eU/k_B T$ ,  $\tilde{i} = i/I_{sat-radial}$  et  $\tilde{R} = eI_{sat-radial} R/k_B T$ . L'équation précédente se réécrit alors :

$$\begin{cases} \tilde{U}_{rad} = \ln(1 + \tilde{i}) + \tilde{R}_{rad} \tilde{i} \\ \tilde{U}_{ax} = \ln(1 + \beta \tilde{i}) + \tilde{R}_{ax} \tilde{i} \end{cases}$$

Eq. 54

où  $\beta = \frac{I_{sat-radial}}{I_{sat-axial}} < 1$ . Les fonctions  $\tilde{U}_{rad}(\tilde{i})$  et  $\tilde{U}_{ax}(\tilde{i})$  sont croissantes et concaves. A titre d'exemple, elles sont tracées dans la Figure 38. Les valeurs de  $\tilde{R}_{rad}$ ,  $\tilde{R}_{ax}$  et  $\beta$  sont indiquées dans la figure. Elles ont été choisies sur des critères didactiques et ne sont pas représentative des valeurs dans le cas réel. Pour de grandes valeurs de  $\tilde{i}$ , la fonction log devient petite devant la partie résistive  $\tilde{R}\tilde{i}$  : dans ce régime, le courant  $\tilde{i}$  est donc de l'ordre de  $\sim \tilde{U}/\tilde{R}$ . Par conséquent, à forte injection, le courant est plus élevé dans la branche de moindre résistance, ce qui permet donc d'expliquer que la luminescence des puits quantiques radiaux domine lorsque  $U$  est suffisamment grand. C'est ce qui se produit dans le cas illustré dans la Figure 38 où l'on remarque que lorsqu' $\tilde{U}$  dépasse environ 4,  $\tilde{i}_{rad}$  devient plus grand que  $\tilde{i}_{ax}$ . On notera que les courbes se comparent à  $\tilde{U}$  fixé et non  $\tilde{i}$  fixé (ce qui est schématisé par les traits en pointillés dans la Figure 38).

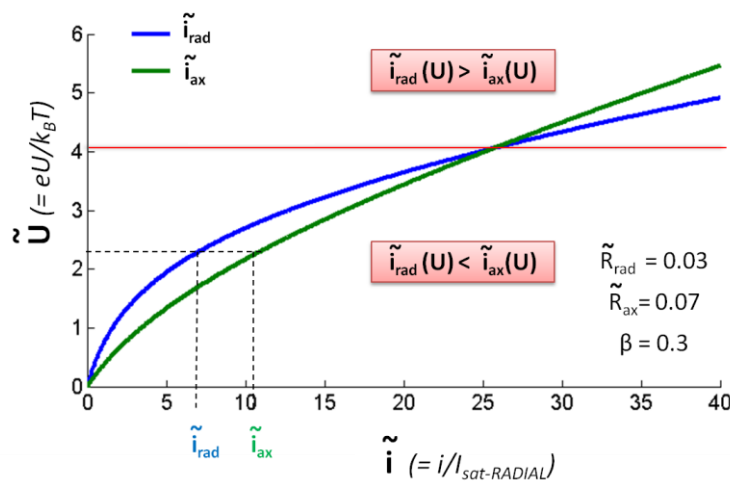


Figure 38 Courbes tension-courant adimensionnées d'une diode en série avec une résistance, d'après l'équation Eq. 54.

Etant donné que les deux fonctions  $\tilde{U}_{rad}(\tilde{i})$  et  $\tilde{U}_{ax}(\tilde{i})$  se coupent et valent 0 en  $\tilde{i} = 0$ , la condition mathématique pour qu'à faible injection le courant soit plus grand dans les puits axiaux que dans les puits radiaux s'écrit :

$$\frac{d\tilde{U}_{rad}}{d\tilde{i}}(\tilde{i} = 0) > \frac{d\tilde{U}_{ax}}{d\tilde{i}}(\tilde{i} = 0)$$

Eq. 55

En écrivant cette équation avec les grandeurs non adimensionnées, on obtient:

$$R_{ax} + \frac{k_B T}{e I_{sat-ax}} < R_{rad} + \frac{k_B T}{e I_{sat-rad}}$$

Eq. 56

Cette équation est représentée graphiquement dans la Figure 39 qui montre les pentes en  $U = 0$ . A la pente liée à la résistance  $R$  s'ajoute la résistance à 0 V de la diode  $\frac{k_B T}{e I_{sat}}$  représentée par une flèche.

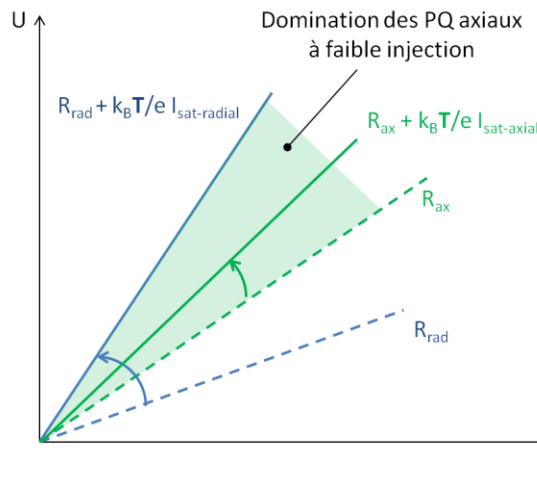


Figure 39 Conditions de domination des PQ axiaux à faible injection illustrant l'équation Eq. 56

On remarque que lorsque le courant de saturation de la diode axiale est suffisamment grand (flèche verte suffisamment petite), l'injection se fait préférentiellement dans les puits axiaux à faible injection. Pour que cela soit possible, il faut cependant que la résistance  $R_{ax}$  soit inférieure à  $R_{rad} + \frac{k_B T}{e I_{sat-rad}}$  (la droite en pointillé vert doit se situer en dessous de la droite bleue continue). Dans le cas contraire, aussi grand soit  $I_{sat-ax}$ , le courant injecté dans la diode axiale est toujours plus petit que celui injecté dans la diode radiale. Ce modèle explique donc bien le comportement de l'EL en fonction du courant et prédit par ailleurs l'existence d'une distance critique entre le contact et le sommet du fil au-delà de laquelle l'injection se fait préférentiellement dans la jonction radiale quelle que soit la tension appliquée.

Qu'en est-il du comportement en température ? Lorsque la température diminue, on s'attend à ce que les résistivités du cœur et de la coquille augmentent. Cela diminue donc la tension à partir de laquelle l'injection se fait préférentiellement dans les puits radiaux au détriment des puits axiaux, comme observé expérimentalement. Cependant, on ne s'attend pas à une augmentation massive de



la résistivité, qui serait alors liée à un gel des porteurs. En effet, l'augmentation de la résistivité est limitée par le basculement d'un mécanisme de conduction « thermique » par l'intermédiaire des porteurs excités thermiquement dans les bandes de conduction ou de valence vers un mécanisme de conduction par l'intermédiaire des niveaux localisés associés aux défauts et aux impureté [68]. La conduction par les défauts et par les impuretés est soit de nature diffusive, lorsque le recouvrement des fonctions d'ondes des états localisés est faible (mais non nulle), soit de type *hopping* lorsque la densité d'impuretés est suffisamment grande pour qu'il se forme une bande d'impureté. La résistivité varie peu avec la température lorsque le mécanisme dominant est la conduction par les défauts[68]. La température à laquelle se fait la transition entre ces deux mécanismes dépend de l'énergie d'activation des dopants. Cette dernière est de l'ordre de 20 meV pour les niveaux donneurs issus du silicium (dopant de type n) et de 200 meV pour les niveaux accepteurs apportés par les dopants magnésium (dopage de type p) [33], [68], [69]. L'énergie d'activation des accepteurs Mg est supérieure à l'énergie thermique à 300 K (26 meV). La conduction dans la coquille p est donc déjà majoritairement de type hopping, même à température ambiante. On ne s'attend donc pas à ce que les résistances  $R_{ax}$  et  $R_{rad}$ , qui dépendent principalement de la résistivité de la coquille, varient fortement avec la température.

Un autre effet qui se combine à l'augmentation de la résistivité de la coquille est lié à la dépendance des caractéristiques courant-tension des diodes en fonction de la température. Considérons le système complet constitué des diodes axiale et radiale avec leur résistance respective. L'équation Eq. 52 indique que le ratio  $\frac{k_B T}{e I_{sat}}$  tend vers l'infini quand T tend vers 0. En se fondant sur l'analyse de la Figure 39 faite précédemment (équation Eq. 56), on en déduit qu'à basse température et à faible injection, le courant passe préférentiellement par les puits axiaux. Ce que l'on cherche à déterminer, c'est l'évolution en fonction de la température de la tension seuil  $U_{seuil}$  au-delà de laquelle l'injection se fait préférentiellement dans les puits radiaux.  $U_{seuil}$  correspond au point d'intersection des deux courbes dans la Figure 38. En ce point, les courants dans les diodes axiales et radiales sont par définition égaux ( $I \equiv I_{seuil}$ ). D'après l'équation Eq. 53, on a alors:

$$\frac{k_B T}{e} \log \left( 1 + \frac{I_{seuil}}{I_{sat,rad}} \right) + R_{rad} I_{seuil} = \frac{k_B T}{e} \log \left( 1 + \frac{I_{seuil}}{I_{sat,ax}} \right) + R_{ax} I_{seuil}$$

**Eq. 57**

En réécrivant les courants de saturation sous la forme suivante

$$I_{sat} = \tilde{I}_{sat} T \exp \left( -\frac{E_g}{k_B T} \right)$$

**Eq. 58**

où  $\tilde{I}_{sat}$  est une grandeur qui ne dépend que faiblement de la température, l'équation Eq. 57 devient<sup>8</sup> :

---

<sup>8</sup> On suppose une nouvelle fois  $I_{seuil} \gg I_{sat,rad}$  et  $I_{seuil} \gg I_{sat,ax}$

$$\frac{k_B T}{e} \left[ \log \left( \frac{\tilde{I}_{sat,ax}}{\tilde{I}_{sat,rad}} \right) + \frac{E_{g,rad} - E_{g,ax}}{k_B T} \right] = (R_{ax} - R_{rad}) I_{seuil}$$

Eq. 59

ce qui conduit à :

$$I_{seuil} = \frac{1}{R_{ax} - R_{rad}} \left[ \frac{E_{g,rad} - E_{g,ax}}{e} + \frac{k_B T}{e} \log \left( \frac{\tilde{I}_{sat,ax}}{\tilde{I}_{sat,rad}} \right) \right]$$

Eq. 60

Il est à ce stage intéressant d'estimer l'importance relative des deux termes entre crochets. D'après les équations Eq. 19, Eq. 20 et Eq. 21, on peut écrire  $\frac{\tilde{I}_{sat,ax}}{\tilde{I}_{sat,rad}} = \frac{(m_r E_g E_P n_{op} S)_{ax}}{(m_r E_g E_P n_{op} S)_{rad}}$  où S représente la surface effective de la jonction. Les autres paramètres ont été définis précédemment. L'énergie de bande interdite est l'élément dépendant le plus de la composition en indium des puits. Il apparaît donc légitime d'approximer ce ratio par  $\frac{E_{g,ax} S_{ax}}{E_{g,rad} S_{rad}}$ , qui est inférieur à 1. La plus faible valeur de ce ratio (qui permet de maximiser en valeur en absolue le logarithme dans l'équation Eq. 60) est obtenue dans le cas de l'échantillon le plus pauvre en indium. Le ratio vaut alors  $\frac{E_{g,ax}}{E_{g,rad}} \approx \frac{2,66}{3,14} = 0.84$ , ce qui conduit à une valeur de  $\frac{k_B T}{e} \log \left( \frac{\tilde{I}_{sat,ax}}{\tilde{I}_{sat,rad}} \right)$  d'environ -62 mV à 300K si l'on suppose que  $\frac{S_{ax}}{S_{rad}}$  est de l'ordre de 0,1. Ce terme est donc environ un ordre de grandeur inférieur à  $\frac{E_{g,rad} - E_{g,ax}}{e}$ , qui vaut environ 480 mV. Pour une première estimation grossière qui facilite le raisonnement par la suite, on néglige donc le second terme. Le courant total injecté dans le fil lorsque l'on bascule de l'injection préférentielle dans les puits axiaux vers l'injection préférentielle dans les puits radiaux peut alors s'écrire :

$$I_{seuil,tot} = 2 I_{seuil} \approx \frac{2}{R_{ax} - R_{rad}} \times \frac{E_{g,rad} - E_{g,ax}}{e}$$

Eq. 61

Le facteur 2 provient du fait que le courant total est la somme des courants injectés dans les puits axiaux et dans les puits radiaux, ces deux courants étant par définition égaux au seuil. Avec les approximations effectuées, on constate que la valeur de courant seuil est indépendante de la température. A l'aide de ce résultat, il devient plus aisé d'analyser l'évolution en fonction de la température de la tension seuil  $U_{seuil}$ . Lors de l'étude des caractéristiques courant-tension des nanofils à segment large, nous avons vu qu'il existe un point fixe (point d'intersection commun à toutes les courbes I-V en fonction de la température). Ce point fixe est obtenu à une tension  $U_0$  donné par l'équation Eq. 50. On peut également définir ce point fixe à partir de la valeur du courant, que l'on appelle  $I_0$  :

$$I_0 = I_{sat} \left( \exp \left( \frac{e U_0}{k_B T} \right) - 1 \right)$$

Eq. 62

Pour connaître l'évolution de  $U_{seuil}$  en fonction de la température, il faut savoir de quel côté du point fixe on se trouve, en comparant  $I_{seuil}$  et  $I_0$ <sup>9</sup>. Lorsque  $I \gg I_0$ , nous avons vu que le courant diminue en fonction de la température. Par conséquent, lorsque  $I_{seuil} \gg I_0$  (ce qui est le cas d'après l'équation Eq. 61 lorsque la résistance  $R_{ax}$  n'est pas trop élevée), la tension  $U_{seuil}$  nécessaire pour maintenir un courant égal à  $I_{seuil}$  augmente avec la température. Ce cas est illustré dans la Figure 40. Les courants de saturation des diodes ont été calculés conformément à l'équation Eq. 58. La valeur de  $\tilde{I}_{sat,rad}$  a été choisie arbitrairement ( $I$  est donc en unité arbitraire).  $\tilde{I}_{sat,ax}$  a été calculé à partir de  $\tilde{I}_{sat,rad}$  en respectant le ratio  $\frac{\tilde{I}_{sat,ax}}{\tilde{I}_{sat,rad}} \sim \frac{E_{g,ax}S_{ax}}{E_{g,rad}S_{rad}}$  avec  $\frac{S_{ax}}{S_{rad}} = 0,1$ . Les résistances  $R_{rad}$  et  $R_{ax}$  ont été choisies de façon à se placer dans la configuration où  $I_{seuil} \gg I_0$ . Le ratio  $R_{ax}/R_{rad}$  est par ailleurs choisi égal à 10. La Figure 40a montre les caractéristiques tension-courant des jonctions axiale (trait pointillé) et radiale (trait continu) à 50 K et 300 K. La tension seuil est obtenue, pour une température donnée, à l'intersection des deux caractéristiques. La tension seuil a été calculée pour des températures entre 50 et 300 K<sup>10</sup>. Le résultat est montré dans la Figure 40b. On remarque que l'on obtient une dépendance de la forme  $U_{seuil} = aT + b$  où  $a$  et  $b$  sont deux constantes. Cette relation se retrouve théoriquement à partir de la caractéristique U-I d'une des jonctions. En prenant par exemple la jonction radiale, on obtient :

$$U_{seuil} = \frac{k_B T}{e} \log \left( 1 + \frac{I_{seuil}}{\tilde{I}_{sat,rad}} \right) + R_{rad} I_{seuil}$$

Eq. 63

En remarquant que  $I_{seuil} \gg \tilde{I}_{sat,rad}$  et en remplaçant  $\tilde{I}_{sat,rad}$  par  $\tilde{I}_{sat,rad} T_0 \left( \frac{T}{T_0} \right) \exp \left( -\frac{E_{g,PQ-rad}}{k_B T} \right)$  (cf. Eq. 58), où  $T_0 = 300\text{ K}$  est une constante d'adimensionnement, on peut réécrire cette équation sous la forme :

$$U_{seuil} = \frac{k_B T}{e} \left[ \log \left( \frac{I_{seuil}}{\tilde{I}_{sat,rad} T_0} \right) + \log \left( \frac{T}{T_0} \right) + \frac{E_{g,PQ-rad}}{k_B T} \right] + R_{rad} I_{seuil}$$

Eq. 64

Un calcul rapide montre que  $|\log \left( \frac{T}{T_0} \right)| \ll \frac{E_{g,PQ-rad}}{k_B T}$ . En remarquant que  $\tilde{I}_{sat,rad} T_0 \approx I_0$  (cf. équation Eq. 62 dans laquelle les équations Eq. 50 et Eq. 58 sont injectées), on obtient alors :

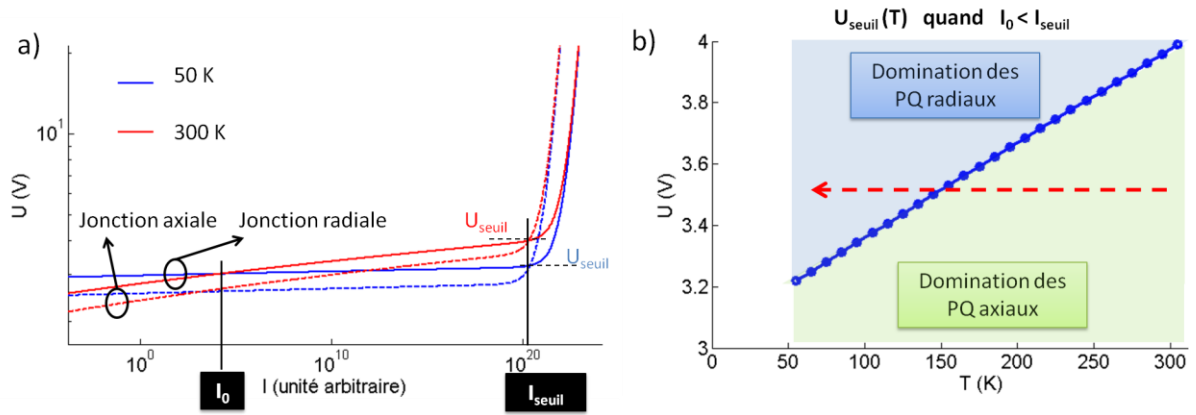
$$U_{seuil} \approx \log \left( \frac{I_{seuil}}{I_0} \right) \frac{k_B}{e} T + \left( \frac{E_{g,PQ-rad}}{e} + R_{rad} I_{seuil} \right),$$

Eq. 65

ce qui est bien de la forme  $U_{seuil} = aT + b$ .

<sup>9</sup> Pour que le raisonnement soit valide, il faut que  $I_{seuil} \gg I_0$  ou  $I_{seuil} \ll I_0$ . La grandeur  $I_0$  n'est en effet pas définie de façon exacte, étant donné que l'intersection des courbes dans la Figure 29 ne se produit pas en un point clairement défini. On notera par ailleurs que la grandeur  $I_0$  peut-être calculée en considérant soit la jonction radiale ou soit la jonction axiale.

<sup>10</sup> En dessous de 50 K, des difficultés liées à la manipulation de grands nombres dans Matlab apparaissent. Le calcul a donc été limité à la gamme de température 50-300K.



**Figure 40 a) Exemple de caractéristique Tension-Courant des jonctions radiales et axiales à 50 K et 300 K dans le cas où  $I_{seuil} > I_0$  calculée avec Matlab b) Tension seuil en fonction de la température dans le cas où  $I_{seuil} > I_0$ . Lorsque la température diminue, on peut passer du régime d'injection préférentielle dans les puits quantiques axiaux vers un régime d'injection préférentielle dans les puits quantiques radiaux (représenté par la flèche rouge).**

En conclusion de ce paragraphe, on peut donc dire que les observations expérimentales sont bien expliquées par ce modèle. Etant donné que les mesures d'EL en fonction de la température ont été effectuées à tension  $U$  constante, ce modèle indique qu'à 300 K, la tension est légèrement en dessous de la tension seuil et la luminescence des puits quantiques axiaux est dominante. Lorsque la température diminue, la tension seuil diminue et passe en dessous de la tension appliquée, comme illustré par la flèche rouge en pointillé dans la Figure 40b : la contribution des puits quantiques radiaux devient donc dominante à basse température. On remarquera enfin que d'après l'équation Eq. 65, lorsque la résistance  $R_{ax}$  devient suffisamment élevée (lorsque le contact est par exemple suffisamment éloigné des puits axiaux), on peut se retrouver dans le cas où  $I_{seuil} < I_0$ . Dans ce cas, on a alors  $\log\left(\frac{I_{seuil}}{I_0}\right) < 0$ . La tension seuil décroît avec la température : dans ce type de situation, on observerait alors un renforcement de la contribution des puits axiaux lorsque la température diminue.

## 5.2.4 Modèle fondé sur le transport des porteurs de charges dans les puits quantiques

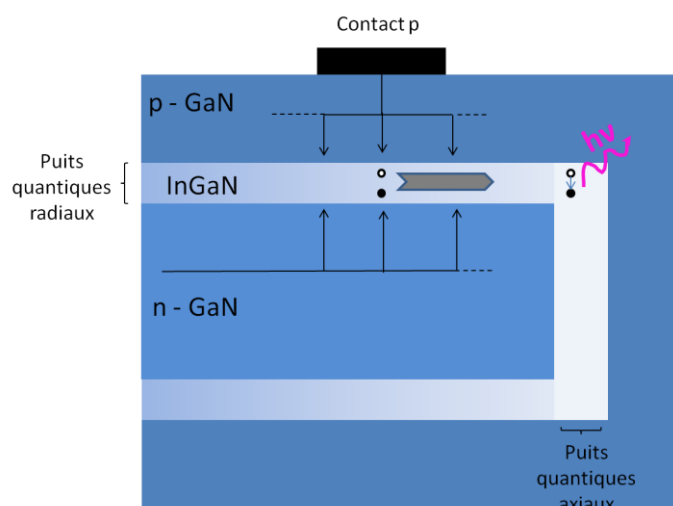


Figure 41 Hypothèse du transport dans les puits des porteurs de charges avant recombinaison

La seconde hypothèse envisageable pour expliquer le comportement de l'EL repose sur l'idée que les porteurs de charges, une fois injectés dans les puits, se déplacent et ont tendance à être captés et à se recombiner dans les minima de potentiel, c'est-à-dire dans les régions les plus riches en indium (cf. Figure 41). Les deux mécanismes de transport possibles sont d'une part la diffusion, sous l'effet d'un gradient de densité des porteurs de charges, et d'autre part la dérive qui se produit soit en présence d'un gradient de potentiel *électrique* (c'est-à-dire un champ électrique) soit en présence d'un gradient de potentiel *électronique* causé par les variations spatiales de la structure de bande du matériau. Ce dernier cas se produit notamment dans les puits quantiques d'InGaN lorsque le taux d'indium ou la largeur du puits varie le long du fil, ce qui induit une dépendance de l'énergie des bords de bande ( $E_c$  et  $E_v$ ) et de l'énergie de confinement des niveaux quantiques avec la position  $z$  le long du fil. On remarquera que le profil des bandes dépend du niveau de dopage : ceci est illustré dans la Figure 42 dans les cas limites de très faible et fort dopage. Pour un très faible dopage (semi-conducteur quasi-intrinsèque), le niveau de Fermi est situé au milieu de la bande interdite<sup>11</sup>. Si l'on injecte localement des porteurs de charges dans cette structure, aussi bien les trous que les électrons dérivent sous l'effet d'un gradient de potentiel.

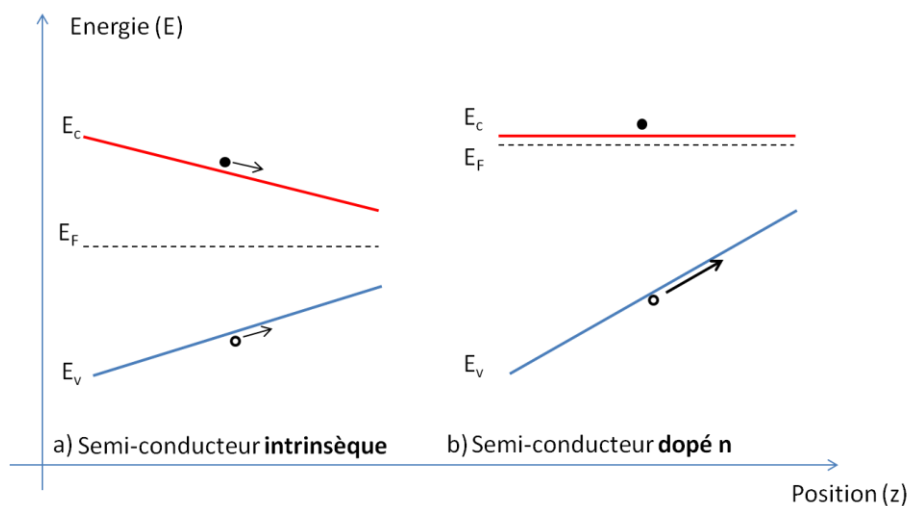
Lorsque le dopage est élevé et de type n par exemple, le niveau de Fermi est situé à proximité de la bande de conduction, dont le profil est alors quasiment plat. Si l'on injecte localement des porteurs de charge dans cette structure, seuls les trous sont soumis à un gradient de potentiel et peuvent dériver.

Pour déterminer dans quelle configuration se trouvent les nanofils InGaN / GaN étudiés, leur structure de bande a été calculée en résolvant de façon auto-consistante les équations de Schrödinger et de Poisson à l'aide du logiciel Nextnano. Idéalement, il serait préférable de faire le calcul avec un modèle bidimensionnel. Cependant, cela nécessite des temps de calcul très longs et pose des problèmes de convergence lorsqu'on prend en compte le gradient d'épaisseur ou de

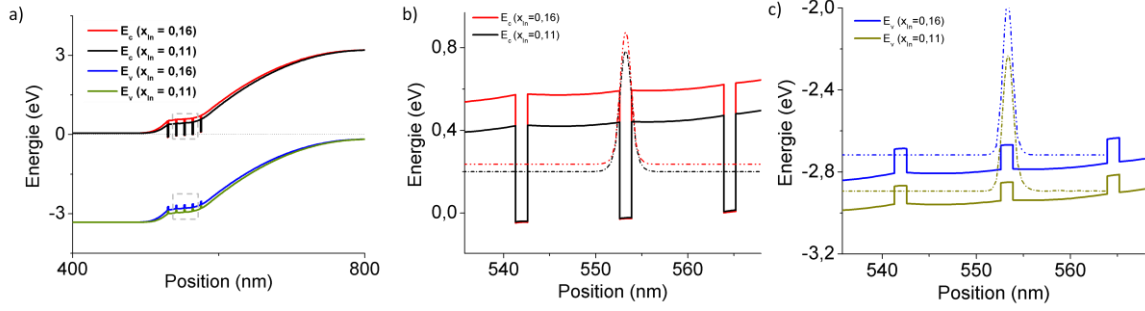
<sup>11</sup> Dans le cas d'un gradient de composition le long du fil, on considère le cas simple où le travail de sortie du semi-conducteur intrinsèque varie peu en fonction de sa composition (sinon un champ électrique apparaît et le niveau de Fermi n'est pas nécessairement au milieu de la bande interdite).

composition des puits. J'ai donc réalisé les calculs en utilisant un modèle 1D. La comparaison des structures de bande avec cinq puits d'InGaN pour des taux d'indium de 0,11 ou 0,16 est présentée dans la Figure 43. La largeur des puits est fixée à 1,3 nm. La Figure 43a montre l'ensemble de la ZCE tandis que les figures b et c se focalisent sur les puits centraux de la région active dans la bande de conduction et de valence respectivement. On constate que l'énergie du bas de la bande de conduction dans les puits ne varie pas en fonction du taux d'indium, ce qui indique que l'on se trouve dans la configuration dopée de la Figure 42. Les énergies des niveaux confinés sont toutefois légèrement différentes : le potentiel ressenti par les électrons n'est donc pas tout à fait constant. En comparant les figures b et c, on constate cependant que l'écart entre les énergies des niveaux confinés est plus important pour les trous que pour les électrons : la variation totale de potentiel est distribuée à environ 15% sur la bande de conduction et 85% sur la bande de valence.

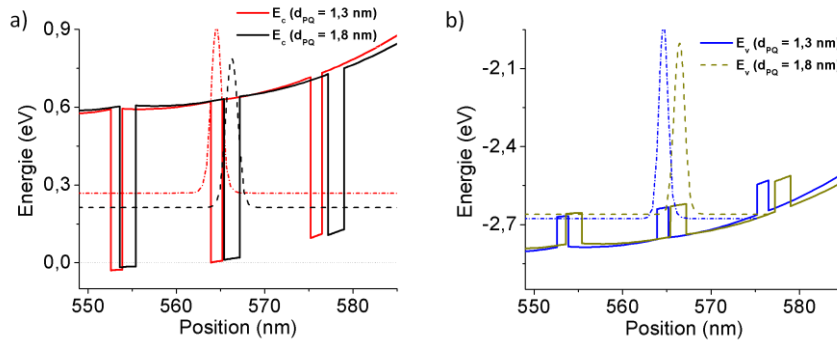
Lorsque l'on fait la même étude en supposant cette fois que c'est la largeur des puits qui varie mais que le taux d'indium est constant, on obtient une situation inverse. Ceci est illustré dans la Figure 44, qui montre les structures de bandes obtenues pour des largeurs de 1.3 et 1.8 nm avec un taux d'indium fixé à 0.16. On constate en effet que l'écart entre les énergies des niveaux confinés est plus important dans la bande de conduction que dans la bande de valence : la variation totale de potentiel est distribuée à 81% sur la bande de conduction et 19% sur la bande de valence.



**Figure 42 Transport d'une charge ponctuelle (électron ou trou) dans un semi-conducteur de type InGaN possédant un gradient de composition.**



**Figure 43 Structures de bande obtenues avec des taux d'indium de 0.16 et 0.11, la largeur des puits étant fixée à 1.3 nm. a) vue de la zone de charge d'espace. Partie centrale de la région active pour la bande de conduction (b) et de valence (c). Les courbes en pointillée représentent, en unité arbitraire, la norme de la fonction d'onde associée au premier (et unique) état quantique confiné dans le puits central. Elles sont décalées verticalement de l'énergie du niveau confiné.**



**Figure 44 Structures de bandes pour des largeurs de puits quantiques de 1.3 et 1.8 nm, le taux d'indium étant fixé à 0.16. Partie centrale de la région active pour la bande de conduction (a) et de valence (b). Les courbes en pointillée représentent, en unité arbitraire, la norme de la fonction d'onde associée au premier (et unique) état quantique confiné dans le puits central. Elles sont décalées verticalement de l'énergie du niveau confiné.**

Suivant l'origine de la variation de l'énergie d'émission des puits quantiques radiaux en fonction de la position (gradient de composition ou d'épaisseur), les profils de bandes sont donc différents. Dans la suite, nous étudierons donc le transport des charges dans le puits dans un cas général, valable pour ces deux configurations.

#### 5.2.4.1 Equations du transport de charges dans une hétérostructure et conditions d'existence d'un courant dans les puits quantiques

Dans un semi-conducteur sans hétérostructure, les équations de transport pour les électrons et pour les trous s'écrivent :

$$J_e = q\mu_e n \mathcal{E} + qD_e \nabla n$$

$$J_t = q\mu_t p \mathcal{E} - qD_p \nabla p$$

**Eq. 66**

où  $\mathcal{E} = \nabla V/q$  est le champ électrique,  $\mu_e$  et  $\mu_t$  correspondent aux mobilités des électrons et des trous,  $D_e$  et  $D_t$  sont les coefficients de diffusion des électrons et des trous respectivement. Le premier terme correspond au courant de dérive et le second au courant de diffusion.

On a par ailleurs:

$$n(x) = N_c \exp\left(-\frac{E_c(x) - E_{F,e}(x)}{k_B T}\right)$$

$E_{F,e}(x)$  représente le quasi-niveau de Fermi des électrons. Par convention, au niveau du contact n situé en  $x = -W_n$ , on a  $V(-W_n) = 0$ . On peut donc écrire :

$$E_c(x) = E_c(-W_n) + V(x)$$

$$E_{F,e}(x) = E_{F,e}(-W_n) + \tilde{E}_{F,e}(x)$$

**Eq. 67**

En posant  $n_n = N_c \exp\left(-\frac{E_c(-W_n) - E_{F,e}(-W_n)}{k_B T}\right)$ , on a donc :

$$n(x) = n_n \exp\left(-\frac{V(x) - \tilde{E}_{F,e}(x)}{k_B T}\right)$$

**Eq. 68**

En présence d'une hétérostructure (gradient de composition, puits quantique), l'énergie du bas de la bande de conduction est également modulée par le potentiel de l'hétérostructure  $V_{heter,c}(x)$ . L'équation Eq. 68 devient donc :

$$n(x) = n_n \exp\left(-\frac{V(x) + V_{heter,c}(x) - \tilde{E}_{F,e}(x)}{k_B T}\right)$$

**Eq. 69**

Le courant de diffusion d'électrons  $J_{e,diff} = qD_e \nabla n$  vaut donc<sup>12</sup> :

$$J_{e,diff} = \frac{qD_e}{k_B T} n(x) (\nabla E_{F,e} - \nabla V - \nabla V_{heter,c})$$

**Eq. 70**

A l'équilibre, la somme du courant de diffusion et du courant de dérive  $J_{e,dérive}$  est nulle. Dans ces conditions, le niveau de Fermi est constant dans la structure. On a donc  $\nabla E_{F,e} = 0$ . En utilisant la relation d'Einstein  $D_e = \frac{k_B T}{q} \mu_e$ , on obtient donc:

$$J_{e,dérive} = \mu_e n(x) (q\mathcal{E} + \nabla V_{heter,c})$$

**Eq. 71**

La présence de l'hétérostructure apporte donc un terme additionnel dans le courant de dérive. On constate de plus que le potentiel d'hétérostructure se comporte de façon équivalente au potentiel électrique et crée l'équivalent d'un champ électrique  $\mathcal{E}_{h,c} = \nabla V_{heter,c}/q$ , qui n'est perçu que par les électrons. Les électrons perçoivent donc un champ effectif  $\mathcal{E}_e = \mathcal{E} + \mathcal{E}_{h,c}$ . On retrouve donc bien le

---

<sup>12</sup> On a utilisé le fait que  $\nabla \tilde{E}_{F,e} = \nabla E_{F,e}$



comportement décrit de façon qualitative au paragraphe précédent. On vérifie par ailleurs qu'en l'absence de ce champ ( $\mathcal{E}_{h,c} = 0$ ), on retrouve la formule habituelle donnée dans l'équation Eq. 66.

Le même raisonnement peut-être utilisé pour les trous. On aboutit alors aux expressions suivantes :

$$J_{t,diff} = \frac{qD_t}{k_B T} p(x) (\nabla E_{F,t} - \nabla V - \nabla V_{heter,v})$$

$$J_{t,dérive} = \mu_t p(x) (q\mathcal{E} + \nabla V_{heter,v})$$

**Eq. 72**

Les trous perçoivent donc un champ effectif  $\mathcal{E}_t = \mathcal{E} + \mathcal{E}_{h,t}$  où  $\mathcal{E}_{h,t} = \nabla V_{heter,v}$ . En sommant les courants de dérive et de diffusion, on obtient le courant total de trous et d'électrons, ce qui donne:

$$J_e = q\mu_e n \nabla E_{F,e}$$

$$J_t = q\mu_t p \nabla E_{F,t}$$

**Eq. 73**

Ces équations permettent d'aboutir à un résultat important de ce paragraphe : il existe un courant de porteurs dans les puits uniquement lorsque les quasi-niveaux de Fermi ne sont pas constants au sein du puits. Cela signifie qu'un courant dans les puits apparait uniquement lorsque le courant total injecté dans le dispositif devient suffisamment fort pour que la chute de potentiel dans la coquille et/ou dans le cœur devienne significative et modifie la distribution du courant dans la jonction, qui n'est alors plus donnée par l'équation Eq. 52.

La contraposée de cette affirmation est qu'il n'y a pas de courant dans les puits lorsque la distribution dans la jonction vérifie l'équation Eq. 52. Les deux raisonnements suivant auxquels on pourrait intuitivement penser sont donc faux :

- D'après l'équation Eq. 52, l'injection des porteurs est fortement inhomogène : la densité de porteurs injectés est très grande dans la région riche en indium. Donc à mesure que l'on augmente la tension appliquée, il va apparaître un courant de diffusion de la région riche en indium vers la région pauvre en indium, ce qui fait apparaître dans le spectre d'EL le pic à haute énergie.
- Bien que d'après l'équation Eq. 52, on injecte des porteurs dans les puits radiaux (certes beaucoup moins que dans les puits axiaux mais tout de même un peu), on ne voit pas la luminescence des puits radiaux car les porteurs dérivent vers la région la plus riche en indium. Le pic d'EL des puits radiaux n'apparait que lorsque l'on a saturé les puits axiaux.

Dans les deux cas, les raisonnements sont faux : dans le premier, le courant de diffusion existe bien mais il est en réalité compensé par le courant de dérive. Dans le deuxième cas, c'est l'inverse : le courant de dérive existe bien mais il est de toute façon compensé par le courant de diffusion.

#### 5.2.4.2 Détermination de la concentration des porteurs injectés ponctuellement dans les puits en présence d'un champ effectif en régime de faible injection

L'hypothèse que nous allons donc étudier est qu'avant même que l'EL apparaisse, la chute de potentiel dans la coquille devient significative, ce qui fait que les trous sont injectés dans les puits directement sous le contact p (comme illustré dans la Figure 41). Comme nous l'avons vu précédemment, les puits contiennent une forte densité d'électrons. On se place donc pour commencer dans l'hypothèse où les trous injectés dans les puits sont minoritaires.

L'équation qui détermine leur transport en régime stationnaire est l'équation de conservation de la charge :

$$\text{div}(J_t) = q(G_t - R_t)$$

Eq. 74

où  $G_t$  et  $R_t$  les taux de génération et de recombinaison des trous. Nous supposons que l'on injecte les trous uniquement en  $x = 0$  au niveau du contact p, donc  $G_t = 0$  et  $R_t = \Delta p / \tau_p$  où  $\tau_p$  est la durée de vie des trous. On suppose que  $\tau_p$  ne dépend pas de la densité de porteur minoritaire (régime de faible injection). En exprimant  $J_p$  à l'aide de l'expression Eq. 66 dans laquelle le champ électrique  $\mathcal{E}$  est remplacé par le champ effectif  $\mathcal{E}_t = \mathcal{E} + \mathcal{E}_{h,v}$ , on obtient :

$$D_t \frac{d^2 \Delta p}{dx^2} - \mathcal{E}_t \mu_t \frac{d \Delta p}{dx} - \frac{\Delta p}{\tau_p} = 0$$

Eq. 75

L'approche pour résoudre cette équation est présentée dans la référence [19]. On cherche des solutions de la forme

$$\Delta p = A \exp\left(-\frac{x}{L_1}\right) + B \exp\left(-\frac{x}{L_2}\right)$$

Eq. 76

Les détails de la résolution sont présentés dans l'annexe I-B. On montre alors que les longueurs  $L_1$  et  $L_2$ , qui sont renommées  $L_{cc}$  pour le transport à contre-courant du champ électrique et  $L_{sc}$  pour le transport dans le sens du courant, sont données par les relations suivantes :

$$\frac{1}{L_{cc}} = \frac{1}{2L_p} \sqrt{\left(\frac{\mathcal{E}_t}{\mathcal{E}_c}\right)^2 + 4} + \frac{\mathcal{E}_t}{2\mathcal{E}_c} \frac{1}{L_p}$$

$$\frac{1}{L_{sc}} = \frac{1}{2L_p} \sqrt{\left(\frac{\mathcal{E}_t}{\mathcal{E}_c}\right)^2 + 4} - \frac{\mathcal{E}_t}{2\mathcal{E}_c} \frac{1}{L_p}$$

Eq. 77

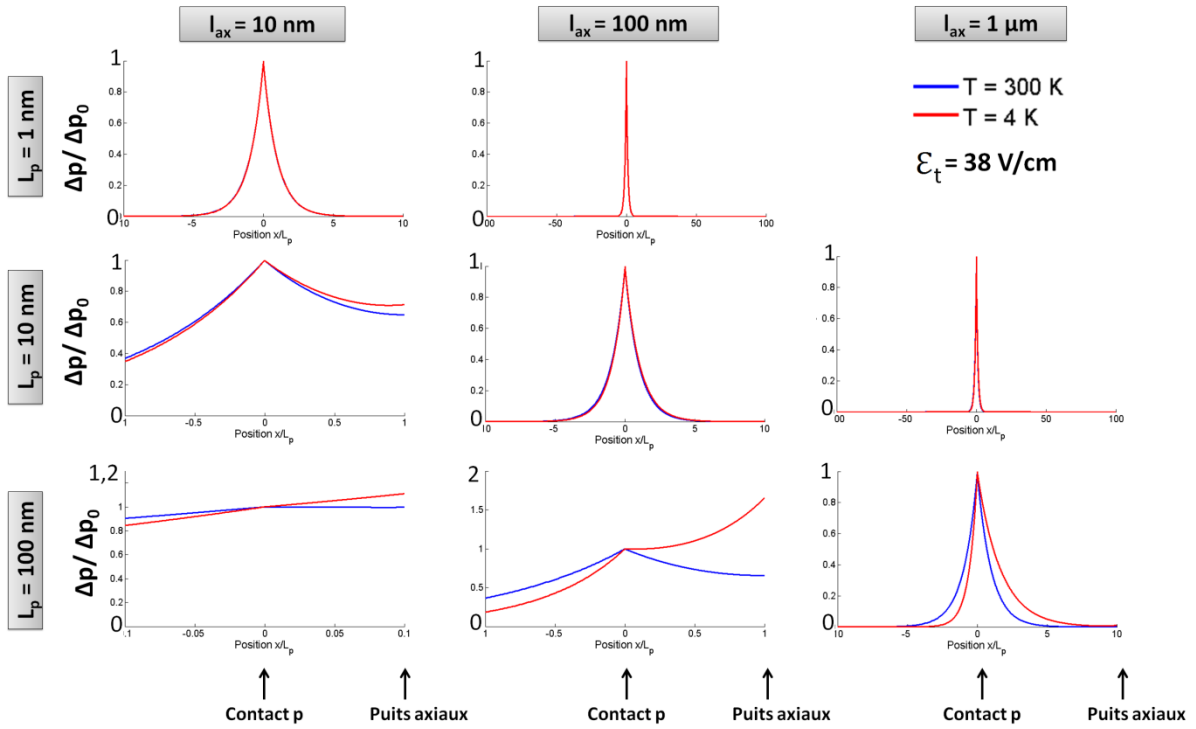
où  $\mathcal{E}_c = k_B T / q L_p$  et  $L_p = \sqrt{D_t \tau_p}$  est la longueur de diffusion des trous. La grandeur  $\mathcal{E}_c$  s'interprète comme une valeur critique du champ électrique à partir de laquelle le phénomène de dérive devient significatif devant le phénomène de diffusion.

D'après les données de catholuminescence, le pic des puits radiaux se décale de 0,12 eV sur une longueur d'environ 6  $\mu\text{m}$ . Le champ effectif maximal est donc de l'ordre de  $\frac{0.12}{6 \times 10^{-4}} = 200 \text{ V/cm}$ . Suivant que l'on est en présence d'un gradient de composition ou d'épaisseur dans les puits, le champ effectif perçu par les trous est donc de l'ordre de  $0.85 \times 200 = 170 \text{ V/cm}$  (85% de la variation totale de potentiel étant distribuée sur la bande de valence) ou  $0.19 \times 200 = 38 \text{ V/cm}$  respectivement (19% de la variation totale de potentiel étant distribuée sur la bande de valence). Les valeurs du champ critique  $\mathcal{E}_c$  calculé pour des longueurs de diffusion de 1, 10 et 100 nm à 300 K et 4 K sont présentées dans le Tableau 4. On constate donc qu'à 300 K, le champ critique est au moins un ordre de grandeur supérieur au champ effectif  $\mathcal{E}_t$ . A 4 K, il est nécessaire que la longueur de diffusion des trous soit supérieure à 10 nm pour que le champ critique soit du même ordre ou supérieure à  $\mathcal{E}_t$ . Les profils de densité de trous ont été calculés dans ces différents cas pour des distances entre le contact et les puits axiaux  $l_{ax}$  de 10, 100 nm et 1  $\mu\text{m}$ . Ils sont présentés dans la Figure 45 dans le cas d'un gradient d'épaisseur des puits et dans la Figure 46 dans le cas d'un gradient de composition.

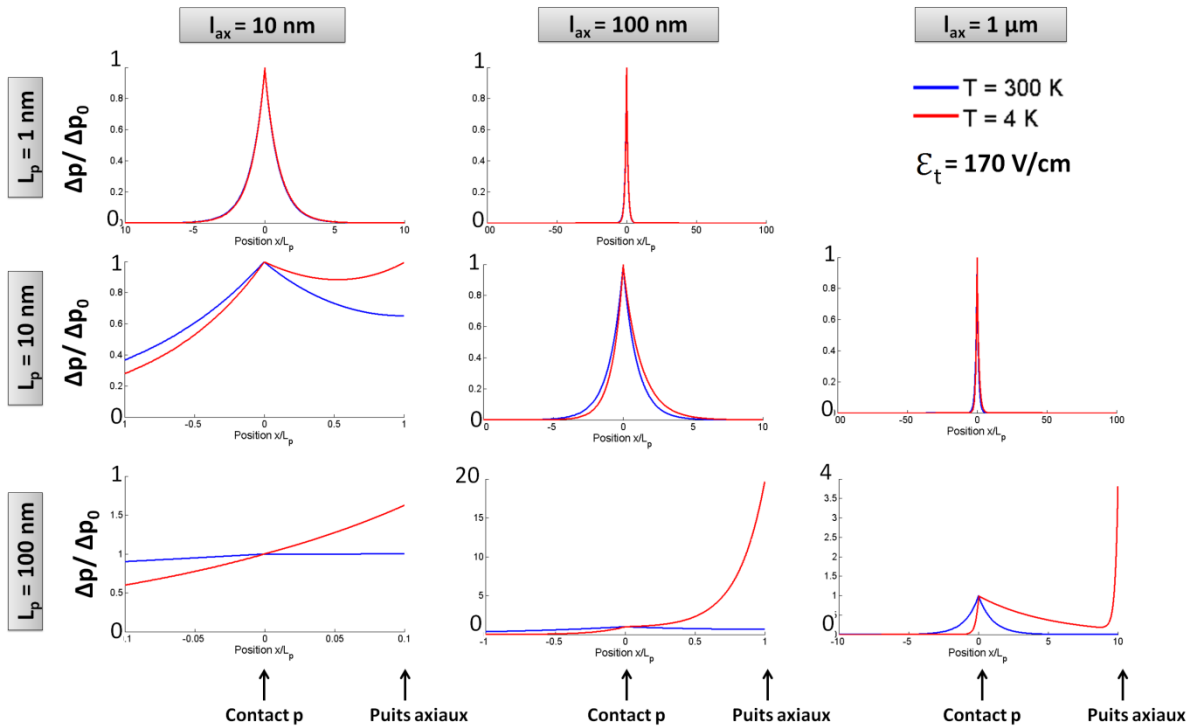
On constate donc que l'accumulation de trous dans les puits axiaux n'est significative que dans le cas du gradient de composition, à 4 K, lorsque l'on suppose que le contact est à une distance comprise entre 100 nm et 1  $\mu\text{m}$  et que la longueur de diffusion des trous est de l'ordre de 100 nm (ce qui est vraisemblablement plus grand que la longueur de diffusion réelle étant donné la forte densité d'électrons dans les puits). Même dans ces cas, la concentration de porteurs dans les puits axiaux est au maximum de  $20 \Delta p_0$ . Cela confirme donc que le transport des charges dans les puits n'est pas très significatif et ne régit pas le comportement de l'EL en fonction du courant et de la température observé.

**Tableau 4** Valeur du champ critique  $\mathcal{E}_c$  à 300 K et 4 K pour différentes valeurs de la longueur de diffusion des trous

$L_p$	T = 300 K	T = 4 K
1 nm	250 kV/cm	3.3 kV/cm
10 nm	25 kV/cm	0.33 kV/cm
100 nm	2,5 kV/cm	0.033 kV/cm



**Figure 45** Densité de trous dans les puits à 300 K et 4 K dans le cas d'un gradient d'épaisseur des puits ( $\varepsilon_t = 38 \text{ V/cm}$ ) pour différentes valeurs de la longueur de diffusion des trous  $L_p$  et différentes distances entre le contact  $p$  et le sommet du fil  $l_{ax}$ . Le contact  $p$  est supposé infiniment mince et en  $x=0$  (les courbes présentent sans cette hypothèse un plateau valant 1 sur la largeur du contact). Les puits axiaux sont localisés à l'extrémité de l'axe des abscisses.



**Figure 46** Densité de trous dans les puits à 300 K et 4 K dans le cas d'un gradient de composition des puits ( $\varepsilon_t = 170 \text{ V/cm}$ ) pour différentes valeurs de la longueur de diffusion des trous  $L_p$  et différentes distances entre le contact  $p$  et le sommet du fil  $l_{ax}$ . Le contact  $p$  est supposé infiniment mince et en  $x=0$  (les courbes présentent sans cette hypothèse un plateau valant 1 sur la largeur du contact). Les puits axiaux sont localisés à l'extrémité de l'axe des abscisses.

### 5.2.4.3 Transport des porteurs de charges dans les puits en régime de forte injection

Avant de clore définitivement l'étude du transport dans les puits, je voudrais revenir sur une hypothèse faite au début du paragraphe précédent. J'ai en effet supposé que l'on était en régime de faible injection ( $\Delta p \ll n$ ) afin de pouvoir résoudre analytiquement les équations (cela permet de supposer que la durée de vie des trous  $\tau_p$  est indépendante de  $\Delta p$ ). Dans le cas réel, il est vraisemblable que cette hypothèse ne soit pas vérifiée. La décroissance de la densité de porteurs en fonction de la distance au contact n'est alors plus exponentielle (elle est plus rapide qu'une exponentielle). De plus, on se trouve alors dans un cas de diffusion ambipolaire des porteurs de charges : les trous et les électrons ne se déplacent plus indépendamment. En reprenant le formalisme utilisé pour établir les équations de transports en régime ambipolaire[19], mais en prenant en compte le fait que le champ perçu par les trous et les électrons est différents en présence d'une hétérostructure, on aboutit alors à l'équation suivante :

$$D \frac{d^2 \Delta p}{dx^2} - (\mu \mathcal{E})_{eq} \frac{d \Delta p}{dx} - \frac{\Delta p}{\tau_p} = 0$$

Eq. 78

avec

$$D = \frac{n + p}{\frac{n}{D_t} + \frac{p}{D_e}}$$

$$(\mu \mathcal{E})_{eq} = \frac{p \mathcal{E}_e - n \mathcal{E}_t}{\frac{n}{\mu_t} + \frac{p}{\mu_e}}$$

Eq. 79

L'équation Eq. 78 est donc similaire à l'équation Eq. 76, avec un coefficient de diffusion et un champ effectif modifié. Dans la limite d'une très forte injection ( $p \sim n$ ), les grandeurs  $D$  et  $(\mu \mathcal{E})_{eq}$  sont approximativement égales à :

$$D \sim \frac{D_e D_t}{D_e + D_t}$$

$$(\mu \mathcal{E})_{eq} \sim \frac{\mu_e \mu_t}{\mu_e + \mu_t} (\mathcal{E}_e - \mathcal{E}_t)$$

Eq. 80

Etant donné que le coefficient de diffusion des trous est nettement plus petit que celui des électrons, on constate que  $D$  est proche de  $D_t$ . Le coefficient de diffusion n'est donc pas très différent du cas de faible injection.

De même, concernant le terme lié à la dérive des porteurs, on constate que les trous se déplacent avec une mobilité effective  $\mu_{eff} = \frac{\mu_e \mu_t}{\mu_e + \mu_t}$  qui est proche de leur mobilité  $\mu_t$  étant donné que  $\mu_e \gg \mu_t$ . Par ailleurs, au lieu de percevoir un champ effectif  $\mathcal{E}_t = \mathcal{E} + \mathcal{E}_{h,v}$ , les trous perçoivent un champ effectif :

$$\mathcal{E}_{eff} = (\mathcal{E} + \mathcal{E}_{h,v}) - (\mathcal{E} + \mathcal{E}_{h,c}) = \mathcal{E}_{h,v} - \mathcal{E}_{h,c}$$

**Eq. 81**

On notera que l'on a dans les cas étudiés jusqu'à présent  $\mathcal{E}_{h,v} \geq 0$  et  $\mathcal{E}_{h,c} \leq 0$ . Les trous perçoivent donc l'intégralité du champ créé par l'hétérostructure (somme en valeur absolue du champ d'hétérostructure des bandes de valence et de conduction).

En conclusion de ce paragraphe, nous pouvons donc dire qu'il n'y a plus de différence entre le gradient d'épaisseur et le gradient de composition lorsqu'on est en régime de diffusion ambipolaire. On remarque par ailleurs que le champ  $\mathcal{E}_{eff}$  est quasiment égal au champ  $\mathcal{E}_t$  dans le cas d'un gradient de composition des puits. On est en effet proche du cas limite où  $\mathcal{E}_c \cong 0$ , pour lequel on a donc  $\mathcal{E} = -\mathcal{E}_{h,c}$ . Le changement de régime entre transport unipolaire et transport ambipolaire n'a donc quasiment pas d'impact lorsque l'on considère un gradient de composition des puits.

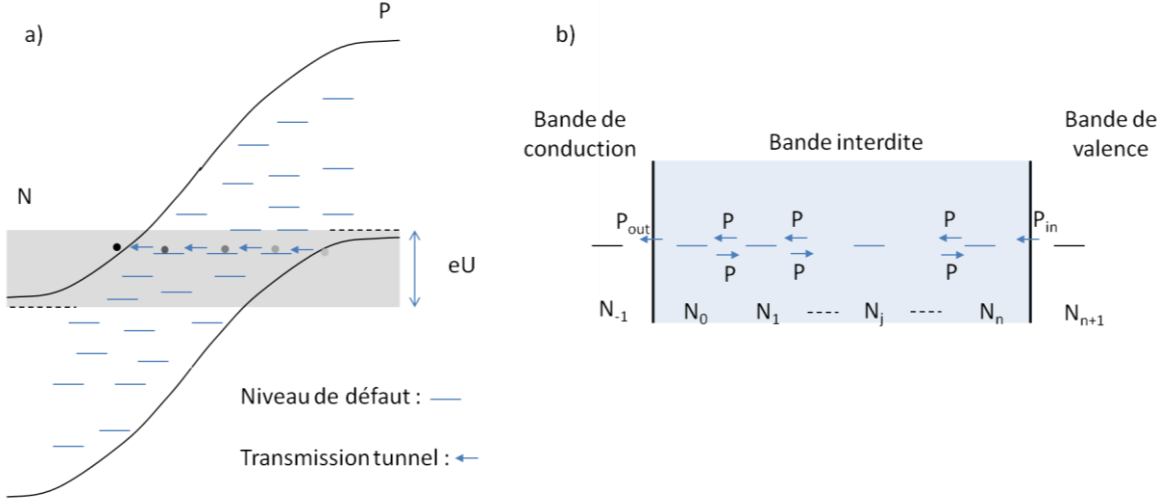
## 6 Conclusion

Dans ce chapitre, j'ai étudié deux types d'hétérostructures. La première hétérostructure est constituée d'un segment large d'InGaN incorporé dans une jonction p-n de GaN. Les courbes courant-tension de dispositifs à nanofil unique ont été analysées de façon détaillée. A l'aide d'un modèle simple que j'ai développé, j'ai pu montrer que le courant de fuite en inverse était dominé par le transport tunnel des électrons de la bande de valence vers la bande de conduction. Le transport des porteurs de charge est assisté par les phonons et se fait à travers la bande interdite du GaN par l'intermédiaire d'états localisés liés aux défauts. Dans l'annexe I-A, je décris et dérive les équations du modèle utilisé pour aboutir à ces résultats. J'ai également cherché à identifier les mécanismes de conduction dominants lorsque l'on polarise la jonction en direct. Les résultats obtenus suggèrent que la conduction est dominée par le transport tunnel par l'intermédiaire des défauts à faible tension. L'apparition d'un autre mécanisme de conduction en dessous de 60 K pour des tensions inférieures à 1.5 V a été mise en évidence. La nature exacte de ce mécanisme n'est cependant pas clairement identifiée. Il pourrait éventuellement s'agir de recombinaisons de type Shockley-Read-Hall. Lorsque la tension appliquée dépasse 3 V, le mécanisme dominant est la recombinaison radiative dans l'InGaN. La domination progressive de ce mécanisme pourrait expliquer la rupture de pente observée dans les caractéristiques courant-tension. Cette rupture est particulièrement visible lorsque l'on observe la fonction  $d(\log(I))/dU$  : elle se traduit par la présence d'une marche sur la courbe. L'analyse des courbes  $d(\log(I))/dU$  met par ailleurs en évidence le phénomène de concentration du courant à proximité du contact, dû à la résistance de la coquille. Ce phénomène a été confirmé par des mesures EBIC. De plus, j'ai montré qu'à forte tension la chute de potentiel dans la coquille au niveau du contact (résistance en série avec la jonction) peut également provoquer une rupture de pente dans les caractéristiques courant-tension. Cela fournit une deuxième hypothèse permettant d'interpréter les courbes  $(\log(I))/dU$ . Une solution qui permettrait d'infirmer l'une des hypothèses consisterait à comparer les courbes courant-tension obtenues avec un nouvel échantillon identique en tout point à celui que nous venons d'étudier, hormis l'épaisseur de la coquille : une coquille plus épaisse devrait induire un décalage de la rupture de pente vers les plus basses tensions, la résistance en série étant plus importante dans ce cas.

La seconde hétérostructure à laquelle je me suis intéressé est une hétérostructure à puits quantiques qui présente la particularité d'être présente à la fois sur les facettes radiales et axiale du nanofil. L'étude de l'électroluminescence en fonction du courant d'injection et de la température a révélé la présence de deux contributions spectrales. A l'aide de la cartographie de cathodoluminescence, ces contributions ont été identifiées comme provenant de l'hétérostructure InGaN/GaN axiale et de l'hétérostructure radiale. Le fonctionnement de LEDs à nanofils uniques a été modélisé à l'aide d'un schéma électrique équivalent permettant de décrire les effets observés expérimentalement. L'étude de cathodoluminescence avait par ailleurs révélé la présence d'un gradient de composition des puits quantiques radiaux le long de l'axe des nanofils. Une autre hypothèse qui aurait donc pu expliquer les observations expérimentale repose sur la diffusion et la dérive des porteurs au sein des puits quantiques. Cependant, j'ai montré, en calculant analytiquement la densité de porteurs au sein des puits quantiques, que cette hypothèse n'était pas valide. La résolution des équations donnant la densité des porteurs injectés ponctuellement dans les puits quantiques en présence d'un champ électrique effectif est présentée dans l'annexe I-B.

# Annexe I-A

## Modèle déterminant l'expression du courant de fuite par effet tunnel assisté par des défauts dans une jonction p-n polarisée en inverse



**Figure 47 a) Schéma de la structure de bande d'une jonction p-n polarisée en inverse illustrant le mécanisme de conduction par les défauts b) Modèle associé au transport tunnel par les défauts**

Dans cette annexe, on cherche à établir une équation permettant de calculer le courant de fuite par effet tunnel dans une jonction pn polarisée en inverse qui contient une forte densité de défauts. On suppose que les défauts créent des états localisés répartis en énergie au sein de la bande interdite. Leur densité doit être suffisante pour permettre l'existence de chemins de conduction par effet tunnel entre la bande de conduction et la bande de valence, comme schématisé dans la Figure 22a. On suppose que le transport tunnel au sein de la bande interdite nécessite  $n$  transmissions tunnel, par l'intermédiaire de  $n + 1$  états localisés que l'on numérote à l'aide d'un indice  $j$  variant entre 0 (état proche de la bande de conduction) et  $n$  (état proche de la bande de valence). On note  $N_j$  la densité d'états de rang  $j$  et  $N_j^e$  la densité d'états occupés par un électron. Un électron situé dans un état de rang  $j$  a une probabilité  $P_{j \rightarrow j-1}$  de passer par effet tunnel dans un état vide de rang  $j - 1$ . La probabilité de transfert tunnel est indépendante du sens de la transition. On a donc nécessairement  $P_{j-1 \rightarrow j} = P_{j \rightarrow j-1}$ . En toute rigueur, il faut noter que  $P_{j-1 \rightarrow j}$  n'est pas une probabilité, c'est une probabilité par unité de temps, en  $s^{-1}$ . Cette grandeur se déduit du Hamiltonien réduit qui décrit le couplage entre les fonctions d'ondes localisées ( $|\Psi_{j-1}\rangle, |\Psi_j\rangle$ ) associées aux défauts  $j - 1$  et  $j$ . Si l'on écrit ce Hamiltonien dans la base ( $|\Psi_{j-1}\rangle, |\Psi_j\rangle$ ) sous la forme suivante,

$$H = \begin{pmatrix} E & -\beta \\ -\beta & E \end{pmatrix}$$

**Eq. 82**



un électron dans l'état  $|\Psi_j\rangle$  à  $t = 0$  se retrouve dans l'état  $|\Psi_{j-1}\rangle$  avec une probabilité égale à 1 au bout d'une durée  $\Delta t = \pi\hbar/2\beta$ . On peut donc définir  $P = 1/\Delta t = 2\beta/\pi\hbar$ .

Afin d'alléger les notations et pour simplifier la résolution, on suppose que la probabilité  $P_{j \rightarrow j-1}$  est indépendante de  $j$ . Elle est alors notée  $P$ . Les états des défauts de rang  $n$  (resp. 0) sont connectés avec les états de la bande de valence (resp. de conduction) avec une probabilité de transfert tunnel notée  $P_{in}$  ( $P_{out}$ ). On suppose que dès qu'un électron atteint un état de la bande de conduction, il est immédiatement balayé par le champ électrique de la ZCE et n'a pas de possibilité de revenir en arrière. Comme indiqué dans la Figure 22b, on suppose donc qu'il n'y a pas de transfert tunnel de la bande de conduction vers des niveaux de défauts de rang 0. De même, lorsqu'un électron de la bande de valence est transféré par effet tunnel vers un état de rang  $n$ , il apparaît un trou dans la bande de valence. Ce trou est balayé par le champ de la jonction vers le côté dopé p. Il est donc très peu probable que l'électron piégé sur le défaut puisse revenir dans la bande de valence, par manque d'état vide disponible. On suppose donc que le transfert de charge ne se fait que dans le sens « bande de valence » vers « défauts de rang  $n$  ».

On cherche à calculer le flux de porteurs arrivant au rang -1 (i.e. dans la bande de conduction). Avec les hypothèses précédentes, l'équation qui régit l'évolution de la densité d'états de rang  $j$  occupés par un électron s'écrit pour  $1 \leq j \leq n-1$ :

$$\frac{dN_j^e}{dt} = PN_{j+1}^e \frac{N_j^0 - N_j^e}{N_j^0} + PN_{j-1}^e \frac{N_j^0 - N_j^e}{N_j^0} - PN_j^e \frac{N_{j+1}^0 - N_{j+1}^e}{N_{j+1}^0} - PN_j^e \frac{N_{j-1}^0 - N_{j-1}^e}{N_{j-1}^0}$$

**Eq. 83**

Le premier terme correspond aux transferts d'électrons qui occupent des niveaux de rang  $j+1$  vers des niveaux vides de rang  $j$ . La densité d'électrons transférés est en effet proportionnelle à la densité d'électrons  $N_{j+1}^e$  occupant un état  $j+1$ , modulée par la probabilité que l'état  $j$  soit vide, qui est donnée par  $\frac{N_j^0 - N_j^e}{N_j^0}$ . Le deuxième terme correspond de façon similaire aux transferts d'électrons qui occupent des niveaux de rang  $j-1$  vers des niveaux vides de rang  $j$ . Le troisième et le quatrième terme correspondent en revanche aux transferts d'électrons qui occupent des niveaux de rang  $j$  vers des niveaux vides de rang  $j+1$  et  $j-1$  respectivement. Pour simplifier, on suppose que les défauts sont répartis de façon homogène au sein de la bande interdite : la grandeur  $N_j^0$  est donc indépendante de  $j$  et vaut  $N$ . On définit le taux d'occupation des niveaux de rang  $j$  par la grandeur  $\tau_j = \frac{N_j^e}{N}$ . En divisant l'équation précédente par  $N$ , on obtient donc :

$$\frac{d\tau_j}{dt} = P(\tau_{j+1} + \tau_{j-1})(1 - \tau_j) - P\tau_j(2 - \tau_{j+1} - \tau_{j-1})$$

**Eq. 84**

En se plaçant en régime stationnaire ( $\frac{d\tau_j}{dt} = 0$ ) et en isolant le terme  $\tau_{j+1}$ , on aboutit à l'équation suivante :

$$\tau_{j+1} = 2\tau_j - \tau_{j-1}$$

**Eq. 85**

La solution de cette relation de récurrence est une dépendance linéaire de  $\tau_j$  en fonction de  $j$ , donnée par :

$$\tau_j = \tau_0 + j \frac{\tau_n - \tau_0}{n}$$

**Eq. 86**

Les valeurs de  $\tau_n$  et  $\tau_0$  sont obtenues en écrivant les équations similaires à Eq. 84 pour les rangs 0 et  $n$ . En notant  $R = N_{n+1}/N$  le rapport entre la densité d'état de la bande de valence et la densité d'état de défauts, on a :

$$\begin{aligned} 0 &= P\tau_1(1 - \tau_0) - P_{out}\tau_0 \\ 0 &= (P_{in}R + P\tau_{n-1})(1 - \tau_n) - P(1 - \tau_{n-1})\tau_n \end{aligned}$$

**Eq. 87**

On remplace alors  $\tau_1$  et  $\tau_{n-1}$  par leur expression donnée par l'équation Eq. 86, et on obtient:

$$\begin{aligned} \tau_0 &= \tau_n \frac{\frac{P}{n}}{\frac{P}{n} + P_{out}} \\ \tau_n &= \frac{P_{in}R \left( \frac{P}{n} + P_{out} \right)}{P_{in}R \left( \frac{P}{n} + P_{out} \right) + P_{out} \frac{P}{n}} \end{aligned}$$

**Eq. 88**

La densité de courant traversant la jonction s'obtient à partir du transfert de charge entre les états de rang 0 et la bande de conduction, soit  $J = -e P_{out} N \tau_0$ . On en déduit donc :

$$J = -e \frac{P_{out} \frac{P}{n} P_{in} R N}{P_{in}R \left( P_{out} + \frac{P}{n} \right) + P_{out} \frac{P}{n}}$$

**Eq. 89**

Pour finir, il nous suffit d'exprimer les variables de cette équation en fonction de la tension appliquée :

- $R = N_{n+1}/N$  est une constante de la structure qui ne dépend pas de  $U$ .
- La modification du champ électrique désaligne les niveaux d'énergie de certains défauts, ce qui diminue la probabilité de transfert par effet tunnel  $P$ . Mais dans le même temps, d'autres défauts dont les niveaux étaient désalignés se retrouvent alignés. En moyenne, la distribution statistique de l'alignement des niveaux de défauts n'est pas modifiée par le champ électrique. Il est donc légitime de supposer que  $P$  dépende peu de la tension appliquée.

- $P_{in}$  et  $P_{out}$  s'expriment en fonction de l'énergie de confinement  $E_{in}$  et  $E_{out}$  des niveaux de défauts qui leur sont associés. L'énergie de confinement est mesurée par rapport au bord de la bande de valence pour  $P_{in}$  et au bord de la bande de conduction pour  $P_{out}$ . L'équation pour ces grandeurs s'écrit [30] :

$$P_{in/out} = \exp\left(-\frac{\pi m_{in/out}^{\frac{1}{2}} E_{in/out}^{\frac{3}{2}}}{2\sqrt{2}q\hbar\mathcal{E}}\right)$$

$m_{in/out}$  est la masse effective tunnel des porteurs qui est égale à la masse effective des trous pour  $P_{in}$  et à la masse effective des électrons pour  $P_{out}$ .  $\mathcal{E}$  correspond au champ électrique et est donc proportionnel à  $(V_{bi} - U)^{\frac{1}{2}}$ .

- La densité d'états de défauts  $N$  disponibles pour passer par effet tunnel jusqu'à la bande de conduction est proportionnelle à  $eU - (E_g - V_{bi})$  d'après la Figure 47.

# Annexe I-B

## Dérivation analytique de la densité des porteurs injectés ponctuellement dans les puits en présence d'un champ effectif en régime de faible injection

---

L'objectif de cette annexe est d'établir l'expression analytique de la densité de porteur dans les puits quantiques en régime de diffusion unipolaire lorsque les porteurs sont injectés ponctuellement, en présence d'un champ effectif. Nous avons vu que l'équation de transport des trous est donnée par :

$$D_t \frac{d^2 \Delta p}{dx^2} - \varepsilon_t \mu_t \frac{d\Delta p}{dx} - \frac{\Delta p}{\tau_p} = 0$$

Eq. 90

Dont on cherche des solutions de la forme :

$$\Delta p = A \exp\left(-\frac{x}{L_1}\right) + B \exp\left(-\frac{x}{L_2}\right)$$

Eq. 91

$\lambda_1 = 1/L_1$  et  $\lambda_2 = 1/L_2$  sont alors les racines de l'équation quadratique suivant :

$$\lambda^2 + \lambda (\varepsilon_t / \varepsilon_c) / L_p - 1 / L_p^2 = 0$$

Eq. 92

Où  $\varepsilon_c = k_B T / q L_p$  et  $L_p = \sqrt{D_t \tau_p}$  est la longueur de diffusion des trous. Les racines de cette équation sont :

$$\lambda = -\frac{\varepsilon_t}{2\varepsilon_c} \frac{1}{L_p} \mp \frac{1}{2L_p} \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_t}{\varepsilon_c}\right)^2 + 4}$$

Eq. 93

La grandeur  $\varepsilon_c$  s'interprète comme une valeur critique du champ électrique à partir de laquelle le phénomène de dérive devient significatif devant le phénomène de diffusion. En effet, dans le cas limite d'un champ effectif très faible ( $\varepsilon_t \ll \varepsilon_c$ ), on retrouve le cas de la diffusion simple avec  $\lambda = \mp \frac{1}{L_p}$ . Inversement, pour le cas d'un champ effectif fort, ( $\varepsilon_t \gg \varepsilon_c$ ), les deux racines peuvent être approximées par :

$$\lambda_1 = -\frac{\varepsilon_t}{\varepsilon_c} \frac{1}{L_p} = -\frac{q \varepsilon_t}{k_B T}$$
$$\lambda_2 = \frac{\varepsilon_c}{\varepsilon_t} \frac{1}{L_p}$$

Eq. 94

La première racine est négative et correspond donc au cas où la diffusion se fait dans le sens opposé au courant de dérive. La deuxième est positive et correspond au contraire à une diffusion dans le sens du courant de dérive. La longueur caractéristique sur laquelle sont transportées les charges est alors égale à la longueur de diffusion amplifiée par le facteur  $\mathcal{E}_t/\mathcal{E}_c$ . Cette première analyse qualitative met par ailleurs en évidence le fait que l'hypothèse de transport des charges dans les puits ne permet pas d'expliquer le comportement de l'EL en fonction de la température. En effet, le champ critique  $\mathcal{E}_c$  est proportionnel à  $T$ , ce qui indique que le phénomène de dérive est d'autant plus important que la température est faible : ce modèle prédit donc une augmentation de l'injection dans les puits axiaux lorsque la température diminue. Il est malgré tout intéressant de poursuivre l'analyse, ne serait-ce que pour confirmer que même à basse température le transport jusqu'au puits axiaux est négligeable, ce qui permettra de vérifier qu'il n'y a pas d'incohérence avec les observations expérimentales.

A partir de  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$ , on peut alors définir les deux grandeurs  $1/L_{cc}$  (cc pour « contre-courant ») et  $1/L_{sc}$  (sc pour « dans le sens du courant ») :

$$\frac{1}{L_{cc}} = \frac{1}{2L_p} \sqrt{\left(\left(\frac{\mathcal{E}_t}{\mathcal{E}_c}\right)^2 + 4\right)} + \frac{\mathcal{E}_t}{2\mathcal{E}_c} \frac{1}{L_p}$$

$$\frac{1}{L_{sc}} = \frac{1}{2L_p} \sqrt{\left(\left(\frac{\mathcal{E}_t}{\mathcal{E}_c}\right)^2 + 4\right)} - \frac{\mathcal{E}_t}{2\mathcal{E}_c} \frac{1}{L_p}$$

*Eq. 95*

Les solutions générales trouvées s'appliquent séparément aux demi-espace  $x < 0$  et  $x > 0$ . Dans le demi-espace  $x < 0$ , la diffusion se fait contre le courant et en direction opposée des puits axiaux. On peut supposer que l'extrémité du fil est situé à une distance très grande devant  $L_{cc}$ , ce qui impose la condition aux limites  $\Delta p(-\infty) = 0$ . En ajoutant la condition aux limites  $\Delta p(x = 0) = \Delta p_0$ , cela conduit à la solution :

$$\Delta p(x) = \Delta p_0 \exp\left(\frac{x}{L_{cc}}\right) \quad (x < 0)$$

*Eq. 96*

Dans le demi-espace,  $x > 0$ , la diffusion se fait en direction des puits axiaux qui sont situés en  $x = l_{ax}$ . La condition aux limites en  $x = l_{ax}$  est que le courant est nul (aucune charge ne s'échappe du fil) :

$$J_t(x = l_{ax}) = 0$$

*Eq. 97*

Ce qui se réécrit

$$\mu_p \Delta p \mathcal{E}_t - D_p \nabla(\Delta p) = 0 \quad (x = l_{ax})$$

*Eq. 98*

En exprimant ces conditions aux limites avec l'équation Eq. 76, on obtient les valeurs de A et B suivantes :

$$A = \Delta p_0 \frac{1}{1 + \exp\left(-l_{ax}\left(\frac{1}{L_{sc}} + \frac{1}{L_{cc}}\right)\right) \left(\frac{\mathcal{E}_c L_p}{\mathcal{E}_t L_{sc}} + 1\right) / \left(\frac{\mathcal{E}_c L_p}{\mathcal{E}_t L_{cc}} - 1\right)}$$

$$B = \Delta p_0 \frac{1}{1 + \exp\left(l_{ax}\left(\frac{1}{L_{sc}} + \frac{1}{L_{cc}}\right)\right) \left(\frac{\mathcal{E}_c L_p}{\mathcal{E}_t L_{cc}} - 1\right) / \left(\frac{\mathcal{E}_c L_p}{\mathcal{E}_t L_{sc}} + 1\right)}$$

**Eq. 99**

On remarque que les constantes A et B sont proportionnelle  $\Delta p_0$  (ce qui découle de la linéarité de l'équation Eq. 75). Le profil normalisé de la densité de porteur ne dépend donc pas du niveau d'injection  $\Delta p_0$ . Par ailleurs, si l'on a dimensionné les longueurs ( $l_{ac}$ ,  $L_{sc}$  et  $L_{cc}$ ) par la longueur de diffusion des trous  $L_p$  et le champ effectif  $\mathcal{E}_t$  par  $\mathcal{E}_c$ , on se rend compte que la solution  $\Delta p(x)/\Delta p_0$  ne s'exprime qu'à l'aide de deux paramètres, à savoir les rapports  $l_{ax}/L_p$  et  $\mathcal{E}_t/\mathcal{E}_c$ .

# Chapitre 2

## Caractérisation des propriétés de transport des nanofils cœur-coquille par mesures de courant induit par faisceau d'électrons (EBIC)

---

1	Introduction .....	91
2	Mesures EBIC.....	94
2.1	Montage expérimental.....	94
2.2	Origine du courant induit par faisceau d'électron .....	95
2.2.1	Interactions du faisceau d'électrons avec la matière et génération de paires électron/trou.....	96
2.2.1.1	Génération à incidence normale .....	96
2.2.1.2	Génération pour une incidence inclinée de 60° (facette latérale des nanofils)..	102
2.2.2	Collecte des porteurs générés par la jonction p-n .....	104
2.2.2.1	En l'absence de recombinaison au sein de la zone de charge d'espace .....	104
2.2.2.2	En présence de recombinaison au sein de la zone de charge d'espace.....	106
2.2.3	Transport des porteurs jusqu'aux contacts.....	109
2.3	Résultats expérimentaux.....	110
2.3.1	Influence de la tension d'accélération $V_{acc}$ .....	110
2.3.2	Influence de la polarisation inverse de la jonction ( $U < 0$ ) .....	118
2.3.3	Influence de la polarisation directe de la jonction ( $U > 0$ V) .....	121
3	Modélisation des propriétés de transport des porteurs majoritaires .....	123
3.1	Influence de la résistance de la coquille.....	125
3.2	Influence du courant d'illumination.....	127
3.3	Influence de la tension appliquée .....	127
3.4	Influence d'une résistance en série avec le dispositif .....	127
3.5	Influence de la résistance du cœur .....	128
3.6	Modulation de la résistance de la coquille sous l'effet de l'excitation par le faisceau d'électrons.....	129
3.7	Influence des fuites distribuées le long du fil.....	130
3.8	Influence d'une fuite par un défaut ponctuel .....	132
4	Comparaison entre les résultats théoriques et expérimentaux.....	134
5	Conclusion .....	138

Annexe II-A - Algorithme de la modélisation du transport des porteurs majoritaires dans une structure cœur-coquille de type jonction p-n - .....	142
Annexe II-B - Détermination analytique de la distance seuil au-delà de laquelle le signal EBIC décroît de façon significative dans le régime de la redistribution du courant dominée par les diodes - .....	147
Annexe II-C - Détermination de la solution analytique donnant le profil EBIC dans le régime dominé par les fuites - .....	152
Annexe II-D - Détermination du profil EBIC en présence d'un défaut ponctuel et application à la détermination expérimentale du profil de résistivité du cœur et de la coquille - .....	156
Annexe II-E - Méthode expérimentale pour déterminer les profils de résistivité du cœur et de la coquille d'un nanofil - .....	163
Annexe II-F - Collecte de la jonction en présence de recombinaison de surface - .....	166

## 1 Introduction

Ce chapitre est consacré aux caractérisations de nanofils cœur-coquille par microscopie de Courant Induit par Faisceau d'Electrons désigné en anglais par l'expression *Electron Beam Induced Current microscopy* (EBIC). Par souci de clarté, l'acronyme anglais « EBIC » sera utilisé dans la suite, son analogue français étant peu courant. L'EBIC est une technique de caractérisation qui permet de sonder les propriétés de transport des porteurs de charges au sein d'un dispositif semi-conducteur. Le principe consiste à générer localement des paires électrons-trous (e/t) au sein du matériau étudié en le bombardant avec un faisceau focalisé d'électrons de haute énergie. En présence d'un champ électrique au sein du dispositif, les paires e/t sont dissociées et induisent ainsi un courant. Ce courant est collecté et mesuré par un circuit externe. Lorsque la surface de l'échantillon est balayée point par point avec le faisceau d'électron, ce signal peut-être utilisé pour former une image : on obtient alors une cartographie qui permet d'analyser les propriétés électriques locales du matériau.

Les premiers travaux qui ont abouti à la microscopie EBIC remontent à la fin des années 50. Un « effet électron-voltaïque dans une jonction p-n induit par un bombardement de particules bêta » a par exemple été mis en évidence par Rappaport en 1954 [70]. Neuf ans plus tard, Lander et al ont montré que l'EBIC permettait d'imager des défauts cristallins [71]: ces auteurs ont observé pour la première fois des dislocations, des couches d'inversion et la zone de charge d'espace (ZCE) de jonctions p-n. En parallèle du développement de la technologie des circuits intégrés qui avait besoin de moyens de caractérisation à l'échelle microscopique pour ses matériaux et ses dispositifs, l'EBIC a connu un essor important jusqu'à la fin des années 80. Cette technique a été utilisée pour plusieurs types d'applications : l'étude des défauts [72], la mesures des longueurs de diffusion des porteurs minoritaires [73], la localisation des jonctions p-n la caractérisation de phénomènes d'avalanche [74], [75] et plus généralement l'étude des dispositifs à base de semi-conducteur [76]. Ces types de caractérisation sont notamment d'une grande importance pour les diodes électroluminescentes planaires, et celles à base de nitrure en particulier [77]–[80]. L'EBIC a connu un regain d'intérêt dans les années 2000 avec le fort développement des nanosciences et le besoin de caractériser des nano-objets.

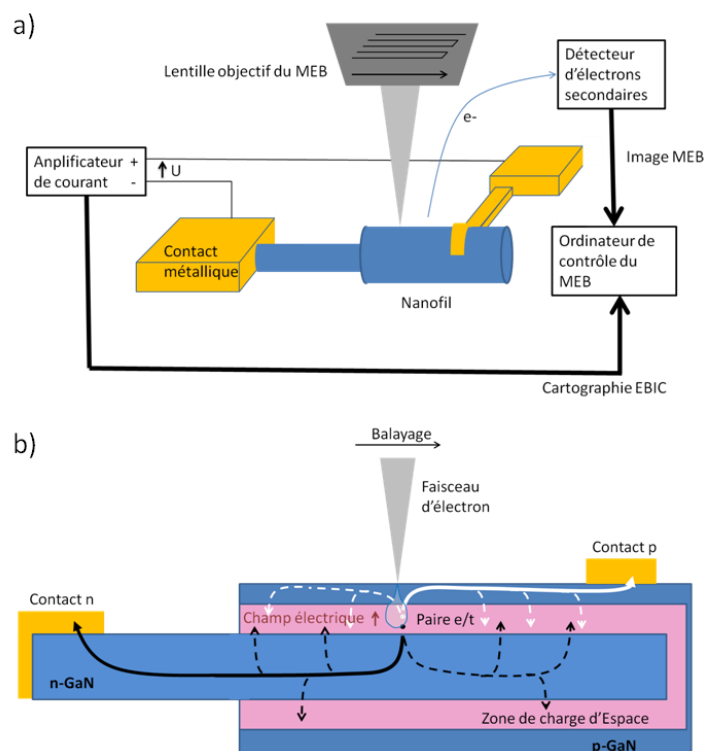


Depuis quelques années, les applications de l'EBIC citées précédemment ont été employées pour la caractérisation des nanofils. Plusieurs groupes de recherche ont ainsi montré que l'EBIC permettait de localiser des hétérostructures axiales dans des dispositifs à nanofil unique [81], [82]. Cette technique a également été utilisée pour mesurer les longueurs de diffusion des porteurs minoritaires dans des jonctions de type Schottky [83] et des jonctions p-n axiales [84]. Ce n'est que récemment que l'EBIC a été employé pour la caractérisation de nanofils possédant une hétérostructure radiale (*i.e.* de type cœur-coquille). Les premiers travaux référencés ont été effectués par notre équipe et ont porté sur des dispositifs à base d'ensemble de nanofils. Ces études ont permis d'étudier la génération locale de courant et d'identifier des inhomogénéités des propriétés électriques d'un nanofil à l'autre [85], [86]. Une des difficultés de la caractérisation des nanofils à structure cœur-coquille provient du fait que la jonction a une géométrie tridimensionnelle, ce qui rend l'analyse et l'interprétation des résultats plus délicates que dans un cas 2D. Pour contourner en partie ce problème, une des possibilités consiste à cliver les fils le long de leur axe et à observer les fils par leur tranche. Cela a été notamment réalisé par les auteurs de la référence [87] qui ont ainsi visualisé la jonction p-n et mesuré les longueurs de diffusion des porteurs minoritaires.

Au-delà de son intérêt académique, la caractérisation EBIC des nanofils cœur-coquille est également susceptible d'intéresser le monde industriel. En effet, comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, les nanofils cœur-coquille InGaN/GaN sont des structures prometteuses pour réaliser des diodes électroluminescentes (LED) [16], [88]. Parmi ses avantages les plus marquants, on peut citer notamment la meilleure qualité cristalline par rapport aux couches minces et la possibilité d'utiliser des substrats à faible coût [11], [89], [90] ; la meilleure efficacité d'extraction des photons [91] ; la meilleure efficacité quantique interne dû à l'absence de champ piezo- et pyro-électrique dans les directions non polaires du cristal ainsi qu'une diminution de l'effet Auger grâce à une plus grande surface effective [14]. Cependant, malgré ces avantages, un défi reste à relever : c'est le contrôle de l'homogénéité structurale. Par exemple, dans les LEDs en nitrure, le taux d'incorporation d'indium et la vitesse de croissance peut varier d'un fil à l'autre, ce qui conduit à une émission multicolore large bande et à des inhomogénéités d'injection [92]. Un autre problème rencontré avec cette technologie est l'absence d'électroluminescence pour une fraction importante des nanofils même lorsque ces fils sont contactés électriquement [92]. La technique de croissance sélective (*Selective-Area Growth* SAG) a apportée des améliorations significative en matière d'homogénéité. Cependant, même si les fils dans de tels dispositifs semblent structuralement identiques, l'électroluminescence peut rester inhomogène en raison de défauts actifs électriquement que l'on ne peut pas détecter à partir de la morphologie des fils. Les techniques existantes de caractérisations structurale et optique telles que la Microscopie Electronique en Transmission (MET) et la cathodoluminescence (CL) peuvent se révéler inadaptées pour comprendre l'absence d'électroluminescence dans certains fils. En ce sens, l'EBIC qui permet de sonder les propriétés électriques à l'échelle nanoscopique offre un moyen pour identifier d'éventuels problèmes de qualité du matériau et pour évaluer l'homogénéité des propriétés électriques au sein d'un fil. La quasi-absence de travaux dans le domaine de l'EBIC des nanofils cœur-coquille rend cependant nécessaire le développement d'une compréhension théorique des propriétés de transport locales dans ces structures.

Le chapitre est organisé en quatre sections suivies d'une conclusion. Dans la première section, la structure des échantillons et la méthode de fabrication des dispositifs à nanofil unique sont décrites de façon assez succincte. La deuxième section est consacrée aux mesures EBIC. Elle commence par une présentation des bases théoriques de l'EBIC et se poursuit par une description et une analyse

des résultats expérimentaux. On y montre notamment que le signal EBIC collecté fournit des informations concernant à la fois la collecte des porteurs minoritaires et le transport des porteurs majoritaires. On montre également que la mesure de l'efficacité de collecte de la jonction en fonction de la tension d'accélération du faisceau et les profils EBIC dans la direction perpendiculaire à l'axe du fil permettent de déterminer la profondeur et l'épaisseur de la zone de collecte de la jonction. La troisième section traite de la modélisation du transport des porteurs de charge majoritaires dans la structure cœur-coquille. L'influence sur les profils EBIC des paramètres structuraux et expérimentaux est étudiée (effet de la résistance de la coquille, du cœur, courant de saturation de la jonction, résistance de fuite etc. ; tension appliquée, courant généré par le faisceau). La quatrième section compare les résultats expérimentaux et les simulations et discute de l'impact des inhomogénéités des propriétés électriques du fil sur les profils EBIC. La conclusion est ensuite suivie de quatre annexes. Dans la première, l'algorithme utilisé pour simuler le transport des porteurs de charge majoritaire est présenté. L'annexe II-B contient la démonstration de la formule donnant la distance à partir du contact électrique de la coquille au-delà de laquelle le signal EBIC décroît fortement lorsque l'on est dans un régime où les fuites à travers la jonction liées à des défauts sont négligeables. Dans l'annexe II-C, on traite au contraire du profil EBIC obtenu lorsque les fuites sont dominantes et réparties de façon homogène le long de l'axe du fil. L'annexe II-D calcule les profils EBIC en présence d'un unique défaut ponctuel. Les résultats obtenus conduisent à une méthode présentée dans l'annexe II-E qui permettrait de mesurer expérimentalement les profils de résistivité du cœur et de la coquille le long de l'axe du fil lorsque le fil possède au moins deux contacts sur sa coquille. La dernière annexe traite de la collecte de la jonction en présence de recombinaison de surface.



**Figure 48 a) Schéma du montage expérimental d'EBIC. b) Mécanisme de génération de courant dans le nanofil soumis à une irradiation d'électron. Le trait continu noir (blanc) correspond à la voie de transport privilégiée pour les électrons (trous). Les traits en pointillés symbolisent les chemins de redistribution du courant qui sont responsable de la diminution de l'efficacité de transport  $\Gamma$ .**

## 2 Mesures EBIC

Les mesures présentées dans ce chapitre ont été réalisées sur des nanofils de l'échantillon T1163 présenté dans le chapitre précédent.

### 2.1 Montage expérimental

Les cartographies EBIC de nanofils uniques ont été mesurées à température ambiante dans un MEB à émission par cathode froide Hitachi SU 8000 en balayant la surface de l'échantillon en incidence normale. Un schéma simplifié du montage expérimental est montré dans la Figure 48a. Une platine du MEB, dédiées aux mesures EBIC, est équipée de micromanipulateurs contrôlables par ordinateur, sur lesquels sont montés des pointes en tungstène permettant de récupérer le signal électrique (analogues à celles utilisées dans une station sous pointe). A l'aide de l'imagerie MEB standard obtenue en utilisant le détecteur d'électrons secondaires, ces pointes sont positionnées au niveau des contacts métalliques fabriqués par lithographie. Au cours de cette manipulation, les pointes sont reliées à la masse tout comme le porte-échantillon, afin de limiter le risque de décharge électrostatique au moment où l'on contacte le dispositif. Une fois posées sur les contacts, les pointes sont connectées à l'extérieur du microscope à un préamplificateur de courant à faible bruit Stanford Research System SR570 qui permet de mesurer le courant traversant le dispositif. Le préamplificateur possède une sortie à haute impédance qui fournit une tension proportionnelle au courant mesuré. Le gain d'amplification est ajustable entre 1 pA/V et 1 mA/V. Cette tension ainsi que les paramètres du préamplificateur sont convertis en signal numérique puis collectés par un ordinateur qui, de façon synchronisée avec le balayage du faisceau d'électron, construit point par point la cartographie EBIC. Le préamplificateur permet par ailleurs d'appliquer une différence de potentiel  $U$  comprise entre -5 et 5 V aux bornes de l'échantillon. Dans le cas d'une tension non nulle, il est possible de compenser totalement ou partiellement le courant d'obscurité de façon à n'amplifier que le signal EBIC qui nous intéresse. Cette compensation a lieu dans la boucle de mesure du préamplificateur et n'affecte bien sûr aucunement le courant qui parcourt réellement l'échantillon. La convention de signe choisie pour la tension et le courant correspond à la convention standard pour les LEDs : lorsqu'une tension positive est appliquée, la jonction p-n est polarisée en direct et le courant d'obscurité est positif, ce qui correspond à l'injection de porteurs dans la jonction. Avec cette convention, le courant EBIC induit par la jonction p-n est négatif (ce qui se traduit sous la forme de régions foncées dans les images EBIC). Les porteurs générés sont en effet extraits de la jonction par le champ électrique interne.

Des cartographies EBIC typiques sont montrées dans la Figure 55. Elles ont été réalisées pour des tensions d'accélération  $V_{acc}$  variant entre 1 kV et 15 kV et un courant d'extraction fixé à 20  $\mu$ A. Le courant du faisceau  $I_{fsc}$  arrivant sur l'échantillon a été mesuré pour différentes tensions d'accélération en focalisant le faisceau au centre d'une cavité de Faraday fixée sur le porte-échantillon connecté à un pico-ampèremètre. Les mesures sont reportées dans le Tableau 5. Le courant  $I_{fsc}$  est de l'ordre de quelques dixièmes de nano-ampère, ce qui est beaucoup plus faible que le courant d'extraction, en raison de la présence d'un diaphragme dans la colonne du microscope. Pour cette même raison, il dépend également légèrement de la tension d'accélération : plus la tension d'accélération est importante, plus le faisceau est collimaté ce qui a pour effet d'augmenter la proportion d'électrons traversant le diaphragme.

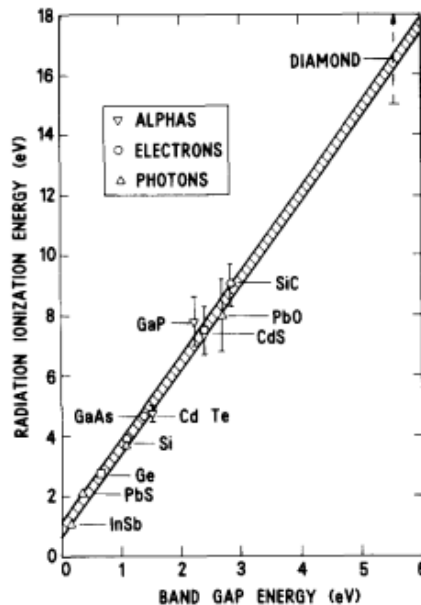
Tension d'accélération $V_{acc}$ (kV)	Courant du faisceau $I_{fsc}$ (nA)	Nb de paires e/t générées par chaque électron incident	Taux de génération total $G$ (s <sup>-1</sup> )	$I_{EBIC}$ si $\Sigma$ et $\Gamma$ sont égaux à 1. ( $\mu$ A)
2	0.41	$194 \pm 5$	$(40 \pm 1) \times 10^{10}$	$0.068 \pm 2 \times 10^{-3}$
3	0.44	$292 \pm 7$	$(66 \pm 2) \times 10^{10}$	$0.106 \pm 3 \times 10^{-3}$
5	0.52	$486 \pm 12$	$(129 \pm 3) \times 10^{10}$	$0.217 \pm 5 \times 10^{-3}$
7	0.65	$681 \pm 17$	$(227 \pm 6) \times 10^{10}$	$0.381 \pm 9 \times 10^{-3}$
10	0.89	$972 \pm 24$	$(45 \pm 1) \times 10^{11}$	$0.75 \pm 2 \times 10^{-2}$
15	1.36	$1458 \pm 35$	$(100 \pm 3) \times 10^{11}$	$1.70 \pm 4 \times 10^{-2}$

**Tableau 5** Courant du faisceau  $I_b$ , mesuré à l'aide d'une cage de Faraday ; le nombre de paires e/t générés par électron incident est égale à  $qV_{acc}/E_{eh}$  ; le taux de génération  $G$  est calculé à partir de l'équation Eq. 104 ; le courant  $I_{EBIC}$  dans le cas où l'efficacité de collection et l'efficacité de transport sont égaux à 1 vaut  $qG$  d'après l'équation Eq. 118.

## 2.2 Origine du courant induit par faisceau d'électron

Après cette présentation du montage expérimental, intéressons nous plus en détails aux processus physiques en jeu dans l'apparition d'un courant dans le dispositif lorsque celui-ci est soumis à une irradiation par un faisceau d'électrons. On peut distinguer trois étapes, illustrées dans la Figure 48b :

- 1) Des paires e/t sont *générées* par le faisceau d'électrons incidents de haute énergie.
- 2) Une partie des paires est *collectée* par la jonction p-n : les paires générées dans la ZCE de la jonction p-n et celles qui diffusent jusqu'à cette zone sans se recombiner sont dissociées et induisent un courant.



**Figure 49** Energie d'ionisation  $E_{ph}$  en fonction de l'énergie de bande interdite mesurée pour différents matériaux. La bande diagonale correspond à l'équation Eq. 100 avec la condition  $0.5 \text{ eV} < r(\hbar\omega_R) < 1.0 \text{ eV}$ . Extrait de la référence [93].

3) Les charges collectées sont *transportées* jusqu'aux contacts. Ce mécanisme est symbolisé par le parcours en trait plein dans la Figure 48b. Au cours de cette étape, à cause de la résistance du cœur et de la coquille, une partie du courant peut être redistribuée dans la jonction, ce qui est représenté par les traits en pointillés dans la Figure 48b.

Dans les paragraphes suivants, les trois étapes mentionnées ci-dessus (génération, collection, transport) sont analysées plus en détails, ce qui va permettre dans la suite d'interpréter les cartes EBIC expérimentales.

## 2.2.1 Interactions du faisceau d'électrons avec la matière et génération de paires électron/trou

### 2.2.1.1 Génération à incidence normale

Pour commencer, il est important de noter que les électrons incidents dont l'énergie<sup>13</sup> est comprise entre quelques kiloélectronvolts (keV) et quelques dizaines de keV n'endommagent généralement pas le matériau observé. Des modifications structurales surviennent pour des énergies plus élevées, de l'ordre de plusieurs dizaines de keV. L'apparition de régions localement riches en indium dans l'InGaN (*clustering* en anglais) se produit par exemple sous l'effet de l'irradiation par des électrons de plusieurs centaines de keV : ce phénomène a été mis en évidence dans des observations de microscopie électronique en transmission [94].

Lorsqu'un électron de haute énergie<sup>14</sup> pénètre dans la matière, son énergie est dissipée principalement par deux phénomènes qui sont en compétition : l'émission de phonons optiques et la génération de paires électron-trous. La génération de paires électron-trou est un processus inélastique dit « d'ionisation » au cours duquel un électron de cœur ou de valence du matériau est promu dans un état non occupé de plus haute énergie situé en bande de conduction ou dans une autre bande de plus haute énergie voire dans un état du continuum. Après le processus d'ionisation, l'électron et le trou générés relaxent dans l'espace réciproque vers leur minimum de potentiel respectif, c'est-à-dire au minimum de la bande de conduction pour l'électron et au maximum de la bande de valence pour le trou. La relaxation de ces porteurs « chauds » se fait par l'intermédiaire de multiples processus, notamment par l'ionisation d'autres paires électron-trou (cascade de génération-multiplication) mais aussi par l'émission de phonons et l'émission de rayonnements X. Le phénomène d'ionisation ne provoque qu'une légère déviation de la trajectoire de l'électron incident de haute énergie. Les ionisations successives peuvent être vues comme un processus au cours duquel l'électron incident est ralenti de façon continue et laisse sur sa trajectoire une trainée de paires électron-trou. Une des grandeurs physiques importante pour décrire ce phénomène est l'énergie moyenne  $E_{eh}$  perdue par l'électron incident dans la formation d'une seule paire électron-trou (une fois les cascades de génération-multiplication prises en compte). Cette grandeur ne dépend pas de l'énergie de l'électron incident dès que celui-ci a une énergie supérieure à quelques keV. Et de façon assez remarquable, elle ne dépend pas non plus de la nature de la particule ionisante : l'énergie d'ionisation est la même lorsque l'on considère un bombardement par des électrons, des

---

<sup>13</sup> L'énergie cinétique des électrons est égale à  $qV_{acc}$  où  $q$  est la charge élémentaire et  $V_{acc}$  la tension d'accélération.

<sup>14</sup> On entend par « haute énergie » une énergie grande devant l'énergie de bande interdite  $E_g$  du matériau irradié

protons, des photons ... [76], [93].  $E_{eh}$  est donc une grandeur caractéristique d'un matériau donné. Elle dépend de l'énergie de bande interdite  $E_g$  du matériau et de l'énergie d'un phonon longitudinal optique (LO)  $\hbar\omega_{LO}$ , et peut être approximée par l'expression suivante [93]:

$$E_{eh} \sim \frac{14}{5} E_g + r(\hbar\omega_{LO})$$

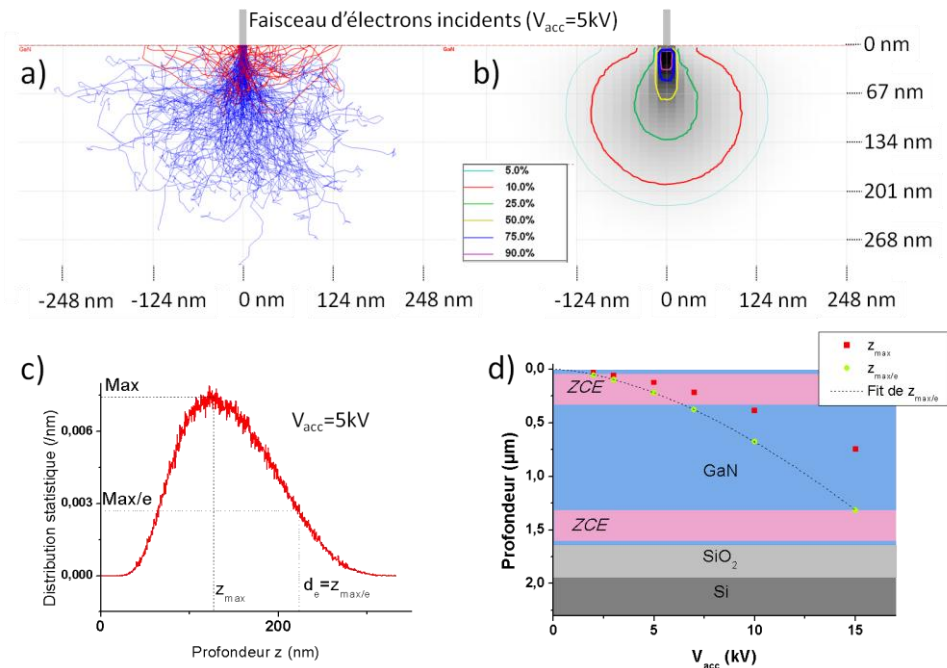
**Eq. 100**

Le terme  $r(\hbar\omega_{LO})$  et plus particulièrement le paramètre adimensionnel  $r$  traduit la compétition entre l'émission de phonons et la génération de paires électrons-trous. En effet,  $r$  peut être interprété comme le ratio  $\frac{\lambda_{phonon}}{\lambda_{e-t}}$  entre les libres parcours moyens de l'électron incident associés à l'émission de phonon optique et à la génération de paire électron-trou. L'équation Eq. 100 découle d'une analyse phénoménologique du processus de génération de paires électron-trou et a été confirmée expérimentalement par plusieurs approches et pour plusieurs matériaux. Comme illustrée dans la Figure 49 issue de la référence [93], il a été constaté expérimentalement que, pour la plupart des matériaux, le terme  $r(\hbar\omega_{LO})$  est compris entre 0.5 et 1.0 eV. Dans le cas du GaN, l'équation Eq. 100 conduit donc à la formule suivante :

$$10.04 \text{ eV} < E_{eh}(\text{GaN}) < 10.54 \text{ eV}$$

**Eq. 101**

Chaque électron incident peut donc générer en moyenne jusqu'à  $qV_{acc}/E_{eh}$  paires électrons trous. Cette quantité calculée pour les valeurs de tension d'accélération utilisées au cours de cette étude est présentée dans la troisième colonne du Tableau 5. On constate que chaque électron génère plusieurs centaines de paires e/t.



**Figure 50 a) Trajectoires de 200 électrons pénétrant dans un substrat de GaN avec une énergie de 5 keV simulées à l'aide du logiciel Casino [95]. b) Courbe iso-énergétique des électrons incidents. c) Distribution statistique des profondeurs atteintes par les électrons incidents d'énergie égale à 5 keV. d) Profondeur  $z_{max}$  et  $z_{max/e}$  en fonction de la tension d'accélération du faisceau.**

En plus du phénomène d'ionisation, les électrons incidents sont également diffusés de façon quasi-élastique par les noyaux des atomes de l'échantillon. Au cours de ce processus, ils dissipent assez peu d'énergie mais sont en revanche fortement déviés de leurs trajectoires initiales. Il en résulte que le faisceau focalisé d'électrons « champignonne » lorsqu'il pénètre dans la matière. Ceci est illustré dans la Figure 50a qui montre les trajectoires de 200 électrons pénétrant à incidence normale dans une couche bidimensionnelle de GaN avec une énergie de 5 keV. Les trajectoires sont déterminées par des simulations Monte Carlo à l'aide du logiciel Casino [50], [95]. Ce programme est spécialement conçu pour simuler les trajectoires d'électrons de faible énergie (0.1 keV-30 keV) dans des solides ou des couches minces. Il utilise des valeurs tabulées des sections efficaces élastiques de Mott [52] (qui caractérisent la diffusion des électrons incidents en fonction de la composition chimique du matériau) et des énergies d'ionisation calculées à partir de valeurs expérimentales [51], [96]. Les courbes bleues correspondent aux trajectoires des électrons qui dissipent l'intégralité de leur énergie cinétique au sein du matériau. Les courbes rouges indiquent le parcours des électrons rétrodiffusés : ces derniers s'échappent du matériau avec une énergie cinétique non nulle. La Figure 50a donne par ailleurs une bonne idée des dimensions du volume de génération, c'est-à-dire du volume au sein duquel sont générées les paires e/t. On constate que la profondeur du volume de génération est du même ordre de grandeur que son extension latérale. Cette dimension caractéristique que l'on note  $d_e$  dépend à la fois de la composition chimique du matériau et de l'énergie des électrons incidents.  $d_e$  peut être déterminé à partir de la distribution statistique des profondeurs maximales atteintes par les électrons incidents. Cette distribution, qui est montrée dans la Figure 50c pour une couche de GaN percutée en incidence normale par des électrons d'énergie égale à 5 keV, présente un maximum pour une profondeur notée  $z_{max}$ . La grandeur  $d_e$  est alors définie comme la profondeur  $z_{max}/e$  pour laquelle la distribution est égale à sa valeur maximale divisée par le nombre d'Euler  $e$ .  $d_e$  est tracé en fonction de la tension d'accélération du faisceau  $V_{acc}$  dans la Figure 50d. Le système simulé dans ce cas comporte un empilement de couche GaN(1.47µm)/SiO<sub>2</sub>(300nm)/Si analogue à celui du fil couché étudié. La géométrie 3D du nanofil a été négligée. La grandeur  $d_e$  suit une loi de puissance en fonction de la tension d'accélération qui est donnée sur la gamme d'énergie qui nous intéresse par :

$$d_e \sim 0.016 \times V_{acc}^{1.63}$$

**Eq. 102**

Dans cette équation,  $d_e$  et  $V_{acc}$  sont exprimés respectivement en µm et kV. Le fit donné par l'équation Eq. 102 est tracé dans la Figure 50d (courbe noire en pointillé). La quantité  $d_e$  joue un rôle important : en normalisant les distances par cette grandeur, on peut en effet décrire le taux de génération local  $g(r, z)$  à l'aide d'une fonction normalisée  $\tilde{g}(\tilde{r}, \tilde{z})$  indépendante de  $d_e$  et donc de  $V_{acc}$  [76].

$$g(r, z) = G \times \tilde{g}\left(\frac{r}{d_e}, \frac{z}{d_e}\right)$$

**Eq. 103**

$\tilde{r} = \frac{r}{d_e}$  et  $\tilde{z} = \frac{z}{d_e}$  sont les coordonnées cylindriques normalisées par  $d_e$ , définies en prenant la direction du faisceau comme axe  $z$  de référence.  $G \equiv \iiint g(r, z) dr dz d\theta$  est le taux de génération total. Il n'existe pas d'expression analytique de  $\tilde{g}$ , cependant quelques unes de ses caractéristiques peuvent être obtenues de manière qualitative en analysant les courbes d'iso-énergie des électrons

incidents calculées par le logiciel Casino. Ces courbes, obtenues en simulant la trajectoire de  $5 \times 10^5$  électrons, sont présentées dans la Figure 50b pour des électrons incidents d'énergie égale à 5 keV qui pénètrent en incidence normale dans une couche de GaN. La figure s'interprète de la façon suivante : une courbe associée à un pourcentage X montre une coupe transverse du volume au sein duquel se répartissent les électrons dont l'énergie cinétique résiduelle est égale à X fois leur énergie initiale. La courbe rouge associée à 10% de l'énergie initiale montre ainsi le volume dans lequel sont générés 90% des paires e/t. On constate que lorsque les électrons entrent dans le matériau, ils génèrent des paires e/t principalement le long de l'axe du faisceau ( $X > 50\%$ ). A mesure que les électrons sont diffusés par la matière, la génération s'étend latéralement. Le volume de génération correspondant à  $X < 10\%$  a une forme plus ou moins sphérique. Le cas  $X = 25\%$  marque la transition entre ces deux géométries : le volume de génération a une forme comparée souvent à celle d'une poire. On constate par ailleurs que la taille caractéristique du volume de génération  $d_e$  coïncide avec la profondeur associée à la courbe d'isoénergie  $X \sim 5\%$ .

Bien que le taux local de génération  $g(r, z)$  soit une fonction relativement complexe à déterminer, on connaît plus facilement le taux de génération total  $G \equiv \iiint g(r, z) dr dz d\theta$ . Puisque chaque électron génère  $qV_{acc}/E_{eh}$  paires électron-trou en moyenne et que  $I_{fsc}/q$  électrons percutent la surface de l'échantillon par unité de temps, on a donc :

$$G = \frac{V_{acc} I_{fsc} (1 - f)}{E_{eh}}$$

**Eq. 104**

Le terme  $(1 - f)$  est ajouté pour prendre en compte le fait que les électrons rétrodiffusés ne dissipent pas l'intégralité de leur énergie et génèrent donc moins de paires électron-trou.  $f$  s'interprète comme la fraction de l'énergie du faisceau qui est réfléchi par l'échantillon. Cette quantité s'exprime en fonction du coefficient de rétrodiffusion  $\zeta$ <sup>15</sup> et de l'énergie moyenne des électrons rétrodiffusés  $\langle E_{rd} \rangle$  par :

$$f = \zeta \frac{\langle E_{rd} \rangle}{qV_{acc}}$$

**Eq. 105**

Le coefficient de rétrodiffusion  $\zeta$  dépend peu de l'énergie du faisceau. Il est principalement déterminé par la composition chimique de l'échantillon et peut être calculé à l'aide de simulations Monte-Carlo ou à partir de l'équation empirique de Heinrich [97] :

$$\zeta = -0.0254 + 0.016Z - 1.86 \times 10^{-4}Z^2 + 8.3 \times 10^{-7}Z^3$$

**Eq. 106**

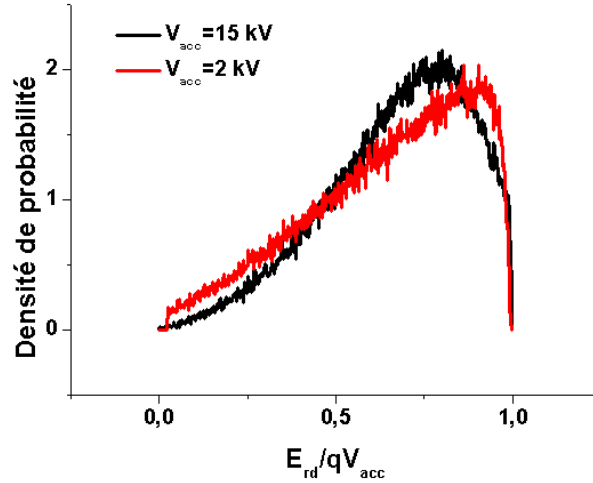
où  $Z$  est le numéro atomique du matériau. Pour les composés binaires tel que le GaN, le coefficient de rétrodiffusion est une moyenne pondérée par les fractions massiques de chaque élément:

---

<sup>15</sup> Le coefficient de rétrodiffusion, défini comme la proportion d'électrons incidents rétrodiffusés, est habituellement appelé  $\eta$  dans la littérature. Pour éviter la confusion avec le coefficient d'idéalité de la jonction p-n, il est ici noté  $\zeta$ .



$\zeta_{GaN} = 0.83 \times \zeta_{Ga} + 0.17 \times \zeta_N$ , ce qui conduit à  $\zeta_{GaN} \approx 0.276$ . Ainsi 27.6 % des électrons incidents sont rétrodiffusés. Cette valeur est proche de celles calculées pour différentes tensions d'accélération avec le logiciel Casino et obtenues en simulant la trajectoire de  $2 \times 10^5$  électrons. Les coefficients de rétrodiffusion simulés avec Casino sont présentés dans la deuxième colonne du Tableau 6. Le système simulé pour les déterminer correspond à celui montré dans la Figure 50d : une couche de GaN de  $1.47 \mu\text{m}$  superposée à une couche de  $\text{SiO}_2$  de 300 nm sur un substrat de Si.



**Figure 51** Distribution statistique de l'énergie des électrons rétrodiffusée  $E_{rd}$  normalisée par l'énergie des électrons incidents ( $qV_{acc}$ ) calculée avec le logiciel Casino.

L'énergie moyenne des électrons rétrodiffusés  $\langle E_{rd} \rangle$  est calculée à partir des distributions statistiques des énergies des électrons rétrodiffusés obtenues pour des tensions d'accélération de 2 à 15 kV à l'aide du logiciel Casino. Les distributions statistiques de  $E_{rd}$  normalisée par l'énergie des électrons incidents  $qV_{acc}$  sont montrées dans la Figure 51 pour deux tensions d'accélération (2 kV et 15 kV). Comme on peut le remarquer, cette distribution est peu dépendante de la tension d'accélération pour la gamme d'énergie qui nous intéresse. Elle devient légèrement plus piquée à forte tension d'accélération. A 2 kV, on trouve une valeur moyenne d'énergie normalisée  $\langle E_{rd} \rangle / qV_{acc}$  égale à environ 0.65 contre 0.67 à 15 kV. Les valeurs pour les autres tensions d'accélération sont reportées dans le Tableau 6. Ces valeurs s'écartent légèrement de la « valeur par défaut » suggérée par Leamy [76] à savoir 1/2. Leamy n'indique pas l'origine de cette valeur. Il est possible qu'elle provienne de l'hypothèse selon laquelle le spectre d'énergie des électrons est « blanc » (*i.e.* constant entre 0 et  $qV_{acc}$ ) : c'est une hypothèse simple et raisonnable en l'absence de données expérimentales ou de données de simulation concernant la distribution statistique des énergies des électrons rétrodiffusés.

Connaissant désormais  $\zeta$  et  $\langle E_{rd} \rangle / qV_{acc}$ , la fraction d'énergie réfléchie  $f$  a été calculée à partir de l'équation Eq. 105 (voir Tableau 6). On constate qu'elle est quasiment constante sur la gamme de tension d'accélération étudiée et vaut  $f \approx 0.18$ .

**Tableau 6 Coefficient de rétrodiffusion, énergie moyenne normalisée des électrons rétrodiffusés et fraction d'énergie réfléchie calculés à l'aide du logiciel Casino pour différentes tensions d'accélération. L'empilement simulé est illustré dans la Figure 49d : GaN (1.47μm) / SiO<sub>2</sub> (300nm) / Si**

Voltage d'accélération $V_{acc}$ (kV)	Coefficient de rétrodiffusion $\zeta$	$\langle E_{rd} \rangle / qV_{acc}$	Fraction d'énergie réfléchie $f$
2	0.280	0.648	0.181
3	0.274	0.659	0.181
5	0.268	0.665	0.178
7	0.270	0.667	0.180
10	0.266	0.669	0.178
15	0.282	0.671	0.189

On dispose désormais de tous les éléments pour calculer le taux de génération total de paires e/t à partir de l'équation Eq. 104. Les valeurs de  $G$  en fonction de la tension d'accélération sont montrées dans le Tableau 5. On constate que le taux de génération varie entre  $4 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$  à 2 kV et  $1 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$  à 15 kV, ce qui correspond à des taux de génération locale moyens  $G / \left[ \frac{4}{3} \pi \left( \frac{d_e}{2} \right)^3 \right]$  de l'ordre de  $5 \times 10^{27} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$  à 2 kV et  $8 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$  à 15 kV. Etant donné que le taux total de génération  $G$  dépend de façon linéaire de  $V_{acc}$  (voir Eq. 104) alors que le volume de génération en dépend suivant  $(d_e)^3 \propto (V_{acc}^{1.63})^3$  (voir Eq. 102), le taux de génération local moyen décroît lorsque la tension d'accélération augmente.

Le taux de génération local en EBIC n'est pas une grandeur physique que l'on emploie fréquemment et pour laquelle on a nécessairement des ordres de grandeurs en tête. Il peut donc être utile, tout d'abord, de comparer sa valeur avec celles obtenues lors d'expériences familières telles que la spectroscopie de micro-photoluminescence : dans ce cas, on utilise couramment un faisceau laser émettant une puissance d'environ 1 mW à une longueur d'onde de 244 nm (5.08 eV) pour laquelle la longueur d'absorption est  $l_{abs} \sim 50 \text{ nm}$ . Le rayon  $r_{spot}$  du spot laser focalisé est généralement de l'ordre de  $\sim 1 \mu\text{m}$ . Le taux de génération moyen dans le volume  $(\pi r_{spot}^2) \times 3l_{abs}$  est alors de  $3 \times 10^{27} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ , proche du taux de génération à 2 kV. Ensuite, afin de rendre plus aisée l'interprétation du taux de génération local, on peut le convertir en concentration de porteur minoritaire généré. On peut alors comparer cette grandeur à la concentration de porteur majoritaire, ce qui permet de définir deux régimes d'injection : le régime de faible injection correspond à la situation où la concentration de porteurs minoritaires générés reste faible devant la concentration de porteur majoritaire. Dans ce régime, on peut alors généralement supposer que le taux de recombinaison des porteurs minoritaires est proportionnel à leur concentration. Lorsque la concentration des porteurs minoritaires devient du même ordre de grandeur que celle des porteurs majoritaire, on dit alors qu'on est en régime de forte injection. Dans ce cas, le taux de recombinaison des porteurs minoritaires n'est plus proportionnel à leur concentration et leur diffusion devient alors de type ambipolaire. Pour calculer la concentration de porteur minoritaire à partir du taux de génération, il faudrait en toute rigueur résoudre les équations du transport en prenant en compte la recombinaison et la diffusion. Une borne supérieure peut cependant être calculée dans un cas simplifié où on néglige la diffusion et on suppose que l'on est en régime de faible injection (voir annexe II-F). Si l'on considère un semi-conducteur dopé p, on obtient alors :

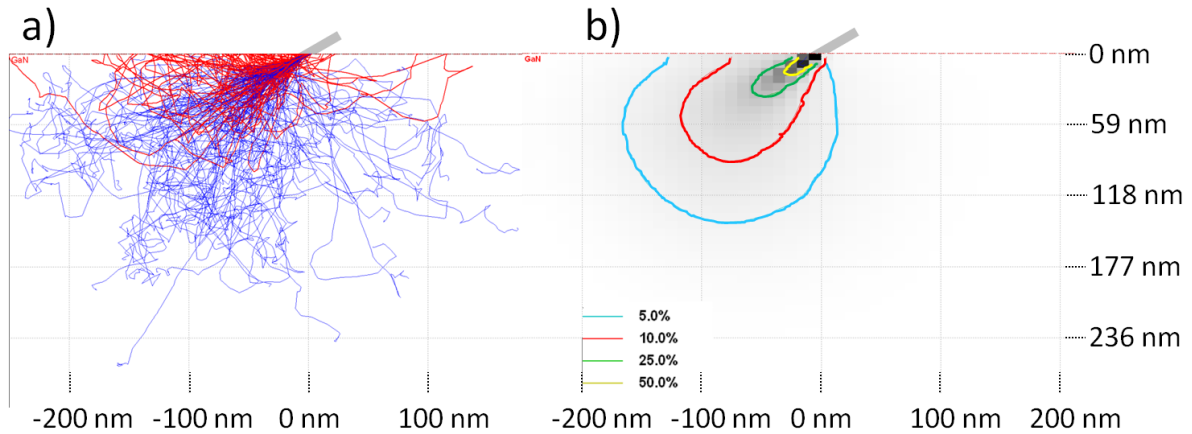
$$n \lesssim g \tau$$

Eq. 107

où  $g$  est le taux de génération local moyen et  $\tau$  est le temps de vie des électrons. Dans notre cas, il paraît raisonnable de supposer que le temps de vie des électrons est compris entre 0.1 et 1 ns [60], [98]. Après calcul, on obtient ainsi qu'à 2 kV et 15 kV, les concentrations d'électrons générés dans la coquille de p-GaN sont respectivement inférieures à  $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  et  $8 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . La concentration de trous étant à l'équilibre de l'ordre de  $6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ , on est nécessairement en régime de faible injection à 15 kV. Cependant, il est probable que le régime de forte injection soit atteint pour des tensions d'accélération suffisamment faibles.

### 2.2.1.2 Génération pour une incidence inclinée de 60° (facette latérale des nanofils)

Dans le paragraphe précédent, le cas d'une incidence du faisceau d'électrons normale à la surface de l'échantillon a été traité. Lorsqu'il balaye les facettes latérales d'un nanofil couché, le faisceau pénètre cependant avec un angle de 60° par rapport à la direction normale à la surface.. Une des conséquences directes est donc qu'une partie plus importante des électrons incidents sortent de l'échantillon avant d'avoir dissipé l'intégralité de leur énergie, comme cela est illustré qualitativement dans la Figure 52a qui montre les trajectoires de 200 électrons pénétrant avec un angle de 60° dans une couche de GaN. La Figure 52b montre les courbes d'iso-énergie des électrons incidents et met en évidence le fait que le volume de génération est « tronqué » en comparaison du cas d'incidence normale. On constate par ailleurs sur cette figure que le volume de génération tend toujours vers une forme sphérique (tronquée) à mesure que l'on considère les courbes d'iso-énergie de plus en plus faibles. Cependant, la transition de la forme allongée vers la forme sphérique se fait pour une énergie cinétique résiduelle plus faible qu'à l'incidence normale (environ 10% de l'énergie initiale contre 25% à incidence normale).

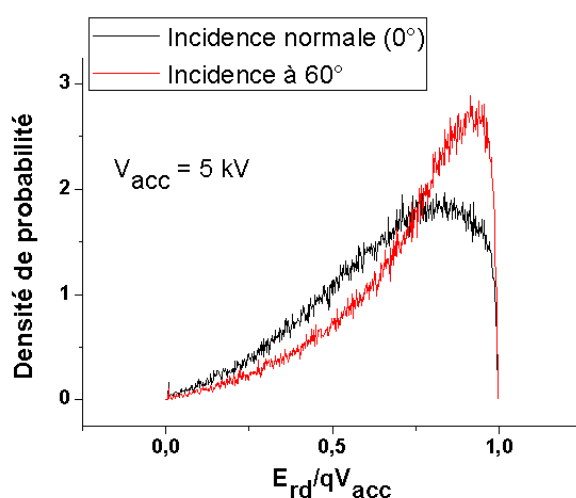


**Figure 52 a) Simulation Casino : trajectoires de 200 électrons de 5 keV pénétrant avec un angle de 60° par rapport à la normale à la surface de l'échantillon constitué de GaN. Le rectangle gris indique le faisceau incident. b) Courbes iso-énergétiques des électrons incidents calculées à partir de la trajectoire de  $2 \times 10^5$  électrons.**

Par rapport à l'incidence normale, le coefficient de rétrodiffusion  $\zeta$  est plus élevé. Il a été calculé avec le logiciel Casino. Les résultats sont montrés dans la deuxième colonne du Tableau 7. On constate que l'augmentation du coefficient de rétrodiffusion est d'autant plus importante que la tension d'accélération est élevée : elle est de +63.2% à 2 kV contre +72.7 % à 15 kV. De même, l'énergie moyenne des électrons rétrodiffusés  $\langle E_{rd} \rangle$  est accrue : ceci est illustré dans la Figure 53 qui

montre la distribution statistique des énergies des électrons rétrodiffusés pour une tension d'accélération de 5 kV. On constate que la proportion des électrons de forte énergie est plus importante pour une incidence de 60° qu'à incidence normale. L'énergie moyenne normalisée des électrons rétrodiffusés  $\langle E_{rd} \rangle / qV_{acc}$  calculée pour différentes tensions d'accélération est montrée dans la troisième colonne du Tableau 7. Elle est environ 10% plus élevée à incidence de 60° qu'à incidence normale. Cette augmentation est d'autant plus marquée que la tension d'accélération est grande.

Il résulte de l'augmentation de  $\zeta$  et de  $\langle E_{rd} \rangle / qV_{acc}$  que la fraction d'énergie réfléchie  $f$  donnée par l'équation Eq. 105 est plus élevée à incidence de 60°. Le taux de génération total  $G$ , proportionnel à  $(1 - f)$ , est au contraire diminué (voir colonnes 4 et 5 du Tableau 7). La baisse du taux de génération est de -16 % à 2 kV et atteint -23% à 15 kV.



**Figure 53 Distributions statistiques des énergies des électrons rétrodiffusés à incidence normale et à une incidence de 60°.** L'axe des abscisses correspond à l'énergie des électrons rétrodiffusés normalisée par leur énergie initiale  $qV_{acc}$ . Les courbes ont été calculées à l'aide du logiciel Casino en simulant la trajectoire de  $2 \times 10^5$  électrons pénétrant dans une couche de GaN avec une énergie de 5 keV.

Voltage d'accélération $V_{acc}$ (kV)	Coefficient de rétrodiffusion $\zeta$ (incidence de 60°)		$\langle E_{rd} \rangle / qV_{acc}$ (incidence de 60°)		Fraction d'énergie réfléchie $f$ (incidence de 60°)		Ratio entre le taux de génération à incidence de 60° et 0° $G_{60^\circ} / G_{0^\circ}$
2	0.457	+ 63.2 %	0.689	+ 6.3 %	0.315	+ 74.0 %	0.84
3	0.456	+ 66.4 %	0.712	+ 8.0 %	0.325	+ 79.6 %	0.82
5	0.463	+ 72.8 %	0.733	+ 10.2 %	0.339	+ 90.4 %	0.80
7	0.470	+ 74.1 %	0.745	+ 11.7 %	0.350	+ 94.4 %	0.79
10	0.472	+ 77.4 %	0.756	+ 13.0 %	0.357	+ 100.6 %	0.78
15	0.487	+ 72.7 %	0.766	+ 14.2 %	0.373	+ 97.4 %	0.77

**Tableau 7 Valeur (colonne de gauche) et accroissement par rapport au cas de l'incidence normale (colonne de droite) du coefficient de rétrodiffusion, de l'énergie moyenne normalisée des électrons rétrodiffusés et de la fraction d'énergie réfléchie pour différentes tensions d'accélération. La dernière colonne indique le ratio entre le taux de génération total à incidence de 60° et à incidence normale.**

### 2.2.2 Collecte des porteurs générés par la jonction p-n

Pour induire un courant dans le dispositif, les paires e/t doivent être dissociées par le champ électrique de la jonction p-n. La recombinaison radiative, la capture par les puits quantiques ou le piégeage sur les défauts réduisent le nombre de porteurs collectés. Ainsi, seule une fraction  $\Sigma$  des paires e/t induisent un courant.  $\Sigma$  est l'efficacité de collecte de la jonction. Le courant localement induit par la jonction  $I_{illum}$  est ainsi donné par :

$$I_{illum} = qG \times \Sigma = q \frac{V_{acc} I_{fsc} (1 - f)}{E_{eh}} \Sigma$$

**Eq. 108**

où  $q$  est la charge élémentaire. Les autres paramètres ont été définis précédemment. Dans le cas idéal d'une structure cœur-coquille homogène, l'efficacité de collecte  $\Sigma$  est constante le long du fil puisque la jonction p-n est parallèle à l'axe du fil. Cependant en présence d'inhomogénéités locales,  $\Sigma$  peut varier localement conduisant ainsi à des cartographies EBIC avec des points « chauds » (plus de signal que la moyenne) ou « froids » (moins de signal).

En règle générale, il n'existe pas de formule analytique de  $\Sigma$ . L'efficacité de collecte dépend à la fois de la géométrie de l'échantillon, des paramètres du matériau (coefficient de diffusion des porteurs de charges, vitesse de recombinaison de surface, etc.) et du taux de génération local  $g(r, z)$ . On pourrait la déterminer numériquement en calculant le courant généré sur bord de la jonction. Il faut pour cela résoudre les équations de la diffusion en prenant en compte les conditions aux limites du système : on suppose généralement que l'excès de porteurs est nul au bord de la jonction et que la vitesse de recombinaison à la surface est donnée par une constante  $S$ . Cette approche est complexe et nécessite de connaître un nombre important de paramètres. Pour estimer assez grossièrement  $\Sigma$ , on peut toutefois s'appuyer sur un cas simple présenté dans le paragraphe qui suit et pour lequel il existe une solution analytique.

#### 2.2.2.1 En l'absence de recombinaison au sein de la zone de charge d'espace

Considérons une jonction p-n planaire excitée de façon uniforme : le taux de génération local  $g(r, z) = g$  est indépendant du temps et des coordonnées d'espace. On suppose que la surface et les contacts sont situés à l'infini (*i.e.* à une distance grande devant la longueur de diffusion des porteurs minoritaires). En résolvant les équations de la diffusion, on obtient le courant de diffusion des trous  $I_t$  sur le bord de la zone de charge d'espace du côté dopé  $n$  qui, pour une tension appliquée nulle, est donné par l'expression suivante (voir eq. 14.2.9 de la réf. [99] par exemple):

$$I_t = -q \cdot g \cdot (A \cdot L_t)$$

**Eq. 109**

où  $L_t$  est la longueur de diffusion des trous et  $A$  est l'aire de la jonction. Cette formule indique que la jonction se comporte comme si elle collectait uniquement et intégralement les trous générés dans le volume  $(A \cdot L_t)$ , *i.e.* les trous générés à une distance de la jonction inférieure à la longueur de diffusion. La formule est également valable du côté  $p$  pour le courant d'électron  $I_e$  en remplaçant la longueur de diffusion des trous par celle des électrons  $L_e$ . Le courant total  $I_{illum}$  généré par la jonction est donc donné par la somme du courant de diffusion des trous et des électrons, ainsi que du courant généré dans la zone de charge d'espace, soit :

$$I_{illum} = I_t - q \cdot g \cdot (A \cdot w) + I_e = -qG \cdot \frac{A \cdot (L_t + w + L_e)}{\Omega}$$

**Eq. 110**

où  $w$  est la largeur de la zone de charge d'espace et  $\Omega$  est le volume dans lequel sont générées les paires  $e/t$ . La relation  $g = G/\Omega$  a été utilisée pour passer du deuxième au dernier terme de l'équation. Le volume  $\Omega$  coïncide dans le cas présent avec le volume du dispositif. Le terme  $-q \cdot g \cdot (A \cdot w)$  correspond au courant induit par les porteurs générés au sein de la zone de charge d'espace. On constate donc que le courant total induit par la jonction est égal à celui que l'on mesurerait si l'on ne collectait que les charges générées dans le volume  $\Omega_{col}$  contenant la zone de charge d'espace élargie du côté  $n$  (resp.  $p$ ) sur une distance égale à la longueur de diffusion des trous  $L_t$  (resp. des électrons  $L_e$ ). En comparant les équations Eq. 108 et Eq. 110, on obtient par identification  $\Sigma = \frac{A \cdot (L_t + w + L_e)}{\Omega} = \frac{\Omega_{col}}{\Omega_{gen}}$ . L'efficacité de collection est donc égale au rapport entre le volume de la zone de collection  $\Omega_{col}$  et le volume du dispositif  $\Omega$  (qui est égal dans le cas présent au volume de génération  $\Omega_{gen}$ ). Dans un cas plus général où le volume de génération ne coïncide pas avec le volume total du dispositif, on peut estimer  $\Sigma$  en généralisant la formule précédente:

$$\Sigma \sim \frac{\Omega_{col} \cap \Omega_{gen}}{\Omega_{gen}}$$

**Eq. 111**

$\Omega_{col} \cap \Omega_{gen}$  est l'intersection du volume de collecte et du volume de génération. Cette généralisation revient à restreindre le système en ne considérant que le volume de génération  $\Omega_{gen}$  au lieu du volume total  $\Omega$ , tout en négligeant les effets de bords provenant de la dimension finie du volume de génération. On peut considérer en première approximation que les effets de bords ont un impact sur la distribution des porteurs de charges sur une longueur de l'ordre de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires  $L$  ( $L_e$  ou  $L_h$  suivant le dopage  $p$  ou  $n$ ). Sachant que le volume de génération a une extension spatiale de l'ordre de  $d_e$  (cf. Eq. 102), les effets de bord sont significatifs dans un volume de l'ordre  $L \times 4\pi \left(\frac{d_e}{2}\right)^2$ . Pour que ceux-ci aient une influence négligeable sur l'efficacité de collecte, il faut donc que ce volume soit petit devant le volume de génération, c'est-à-dire :

$$L \times 4\pi \left(\frac{d_e}{2}\right)^2 \ll \frac{4\pi}{3} \left(\frac{d_e}{2}\right)^3$$

ce qui est équivalent à :

$$d_e \gg 6 \cdot L$$

**Eq. 112**

L'équation Eq. 112 fournit une condition de validité de l'équation Eq. 111. Cette condition est nécessaire mais non suffisante. Puisque l'on a supposé pour établir l'équation Eq. 110 que le taux de génération local  $g(r, z)$  était constant, on comprend que, pour que la formule généralisée (Eq. 111) soit valable dans un cas plus général, il faut aussi que le taux de génération local  $g(r, z)$  ne varie pas trop fortement au sein du volume de génération. Cette condition de régularité ne peut pas être

décrite mathématiquement de façon simple, cependant, on comprend qu'elle est d'autant plus forte et contraignante que le volume de la zone de collecte est petit en comparaison du volume de génération. En effet, dans le cas où le volume de la zone de collecte est très petit, le courant collecté et l'efficacité de collecte sont extrêmement sensibles à la valeur locale de  $g(r, z)$ . Pour que l'équation Eq. 111 fournisse une approximation acceptable, il ne faut donc pas que la fonction  $g(r, z)$  s'écarte trop de sa valeur moyenne. Dans le cas extrême contraire où la zone de collecte contient tout le volume de génération, toutes les paires e/t générées sont collectées. La régularité de la fonction  $g(r, z)$  ne joue alors aucun rôle et seule sa valeur moyenne importe.

Lorsque la condition donnée par l'équation Eq. 112 n'est pas satisfaite, l'équation Eq. 111 fournit dans la plupart des cas une majoration de l'efficacité de collecte : la dimension finie du volume de génération induisant des courants de diffusion orientés vers l'extérieur du volume de génération ainsi que les recombinaisons additionnelles provenant de la surface de l'échantillon et des contacts diminuent la probabilité que les porteurs de charges diffusent jusqu'à la jonction sans recombinaison avec un porteur majoritaire.

### 2.2.2.2 En présence de recombinaison au sein de la zone de charge d'espace

Lorsque qu'un porteur de charge minoritaire est capturé par un défaut ou se recombine avec un porteur majoritaire dans une région neutre (*i.e.* en dehors de la ZCE), ce porteur ne génère aucun courant dans le circuit de mesure. A l'inverse, quand un porteur de charge se déplace au sein de la ZCE, il génère un courant mesurable dans le circuit externe. Dans le paragraphe précédent, nous avons supposé que la recombinaison des porteurs au sein de la ZCE était négligeable. Pourtant, en présence de puits quantiques, lorsque la ZCE est large ou quand la densité de défaut est importante, les porteurs de charges peuvent être piégés pendant qu'ils traversent la ZCE. La question qui nous occupe dans ce paragraphe est donc de savoir comment le courant induit dans le circuit de mesure est modifié lorsque les porteurs sont capturés pendant leur transit dans la ZCE. La réponse à cette question est en partie donnée par le théorème de Shockley-Ramo [100]. Ce théorème trouvé indépendamment par Shockley [101] et Ramo [102] en 1938 traite du courant induit dans des conducteurs par le déplacement d'une charge ponctuelle entre ces conducteurs. Dans notre cas, les conducteurs (dénommés électrodes dans le théorème) correspondent aux régions neutres du cœur dopé n et de la coquille dopée p. Pour pouvoir appliquer ce théorème, on suppose donc que le cœur et la coquille sont suffisamment dopés pour qu'ils soient équipotentiels. L'effet d'une conductivité finie du cœur et de la coquille sera discuté dans le paragraphe suivant. Le théorème de Shockley-Ramo montre que la charge  $Q$  et le courant  $i$  dans une électrode induits par le mouvement d'une charge ponctuelle  $q_c = \pm q$  s'écrivent :

$$Q = -q_c \varphi_0(x)$$

Eq. 113

$$i = q_c \mathbf{v} \cdot \mathbf{E}_0(x)$$

Eq. 114

où  $\mathbf{v}$  est la vitesse instantanée de la charge  $q_c$ .  $\varphi_0(x)$  et  $\mathbf{E}_0(x)$  sont respectivement le potentiel électrique et le champ électrique qui existeraient à la position instantanée  $x$  de la charge  $q_c$  dans les conditions suivantes : l'électrode sélectionnée est à un potentiel *unitaire*, les autres électrodes sont à la masse (potentiel zéro) et toutes les charges fixes, notamment celles de la ZCE, sont retirées du

système. Il faut noter que la grandeur  $\varphi_0(x)$  dans les équations Eq. 113 et Eq. 114 est en fait sans unité.  $\varphi_0(x)$  correspond en toute rigueur à un potentiel *normalisé*. De même, l'unité de  $\mathbf{E}_0(x)$  est  $m^{-1}$  et non  $V.m^{-1}$ . On désigne donc parfois  $\varphi_0(x)$  et  $\mathbf{E}_0(x)$  par les termes « potentiel électrique de pondération » et « champ électrique de pondération ». Une démonstration de ce théorème fondée sur la conservation de l'énergie est proposée dans la référence [100].

Bien que l'énoncé du théorème puisse sembler assez complexe, on peut néanmoins se convaincre facilement de l'existence du phénomène physique qu'il traduit. En effet, lorsqu'une charge  $q_c$  est placée à proximité d'un conducteur, le champ électrique qu'elle crée induit une distribution de charges à la surface du conducteur de façon à l'écranter et garantir ainsi que le champ électrique au sein du conducteur est nul. Lorsque la charge  $q_c$  se déplace, la charge surfacique est modifiée en conséquence. Cette charge surfacique additionnelle est apportée par le générateur auquel est connecté le conducteur : le générateur maintient ainsi le potentiel du conducteur à une valeur constante. Cela se traduit par un courant parcourant le circuit externe. Par exemple, lorsque la charge  $q_c$  se déplace d'une électrode A située en  $x_A$  jusqu'à une électrode B située en  $x_B$ , la variation de charge sur l'électrode B vaut d'après l'équation Eq. 113 :

$$\Delta Q_B = -q_c(\varphi_0(x_B) - \varphi_0(x_A)) = -q_c(1 - 0) = -q_c$$

**Eq. 115**

Ainsi une charge de signe *opposé* à  $q_c$  est transférée du générateur *vers l'électrode B*, ou de façon équivalente une charge du *même* signe que  $q_c$  est transférée de l'électrode B *vers le générateur*. A l'inverse, sur l'électrode A, la variation de charge vaut  $\Delta Q_A = +q_c$ . Ainsi, lorsque la charge  $q_c$  se déplace de l'électrode A vers l'électrode B, on a simultanément un transfert d'une charge de même signe du générateur vers l'électrode A et d'une autre charge de l'électrode B vers le générateur. A travers le théorème de Shockley-Ramo, on retrouve finalement une propriété bien connue : le courant est à chaque instant le même en chaque point d'un circuit en série.

Dans le cas d'un nanofil cœur-coquille avec une jonction p-n, le cœur dopé n et la coquille dopée p forment deux électrodes parallèles séparées par la ZCE de largeur  $w$ . Dans l'approximation où l'on considère des électrodes planaires, le potentiel de pondération varie linéairement d'une électrode à l'autre. Si une charge  $q_c$  ne traverse qu'une portion de la ZCE sur une distance  $\Delta w$  parce qu'elle a été piégée, le théorème de Shockley-Ramo indique alors que la charge induite  $\Delta Q$  sur les électrodes ne vaut qu'une portion de charge élémentaire [103] :

$$\Delta Q = q \frac{\Delta w}{w}$$

**Eq. 116**

On remarque au passage que l'équation Eq. 116 s'applique également dans le cas où une paire électron-trou est générée directement au sein de la ZCE. Elle montre alors que la contribution du trou et de l'électron au courant total généré n'est pas identique : le trou contribue à générer sur les électrodes une charge  $q \frac{\Delta w}{w}$  où  $\Delta w$  est la distance entre la position où la paire est générée et le bord de la ZCE du côté dopé p. En revanche, l'électron contribue à générer une charge  $q \frac{w - \Delta w}{w}$ . On vérifie que la somme des deux contributions est égale à la charge élémentaire  $q$ .

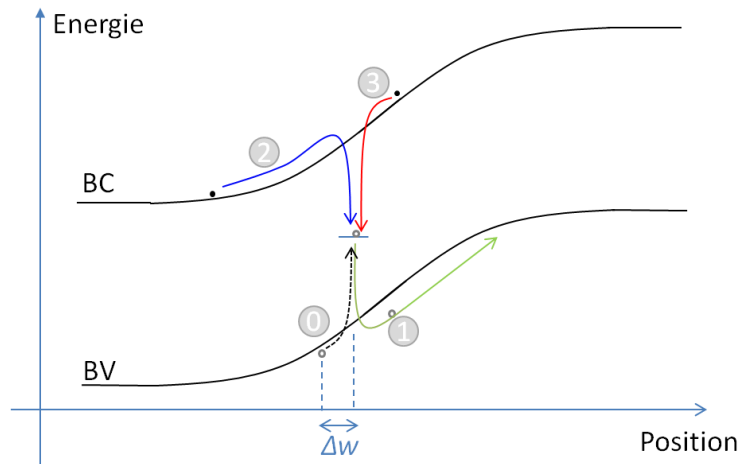


Il est important de noter que, pour calculer le courant total généré par un porteur de charge se faisant piéger pendant sa traversée de la ZCE, l'équation Eq. 116 pour laquelle  $\Delta w$  représente la distance parcourue par la charge avant de se faire piéger n'est *a priori* pas suffisante. En effet, une fois que le porteur est capturé par un piège, le système se trouve dans un état hors équilibre. Les mécanismes de retour à l'équilibre ou au quasi-équilibre engendrent eux-mêmes un courant qu'il faut prendre en compte. Considérons par exemple le cas d'un trou piégé. On peut distinguer au moins trois mécanismes schématisés sur la Figure 54.

- Le premier mécanisme est l'échappement thermique du trou. Le taux d'échappement est proportionnel à  $\exp(-\frac{\Delta E_{def}}{k_b T})$  où  $\Delta E_{def}$  est l'écart d'énergie en valeur absolue entre le niveau du défaut et le maximum de la bande de valence si l'on considère un trou piégé ou entre le niveau du défaut et le minimum de la bande de conduction dans le cas d'un électron piégé. Dans les semiconducteurs à grand gap, on s'attend donc à ce que ce mécanisme d'échappement possède des temps caractéristiques longs. Ce mécanisme conduit à une efficacité de collecte de la paire électron-trou égale à 1, le piégeage ne faisant que retarder sa collecte.
- Le second mécanisme est la recombinaison du trou avec un électron issu du côté n. La probabilité de ce mécanisme dépend de la position du piège au sein de la ZCE. Pour les semiconducteurs à grand énergie de bande interdite, on s'attend à ce que le temps caractéristique associé soit long. Ce mécanisme conduit à une efficacité de collecte de la paire électron-trou nulle.
- Le troisième mécanisme est la recombinaison avec un électron issu du côté p. Cet électron peut avoir été généré thermiquement ou par le faisceau incident. C'est uniquement avec ce troisième mécanisme que l'équation Eq. 116 est applicable. Dans la plupart des cas, on s'attend cependant à ce que ce soit le mécanisme prédominant étant donné les forts taux de génération calculés précédemment. Si l'on note  $\langle \Delta w \rangle$  la distance moyenne parcourue par les porteurs de charge au sein de la ZCE, l'équation Eq. 111 devient alors:

$$\Sigma \sim \frac{\Omega_{col} \cap \Omega_{gen}}{\Omega_{gen}} \frac{\langle \Delta w \rangle}{w}$$

**Eq. 117**



**Figure 54** Schéma des bandes de valence (BV) et de conduction (BC) d'une jonction p-n à 0 V montrant les différents mécanismes de retour à l'équilibre après la capture d'un trou par un défaut situé dans la zone de charge d'espace (0). (1) Echappement thermique du trou. (2) Recombinaison du trou avec un électron issu du côté dopé n (3) Recombinaison du trou avec un électron généré du côté dopé p (issu de la génération par le faisceau d'électrons incidents principalement)

### 2.2.3 Transport des porteurs jusqu'aux contacts

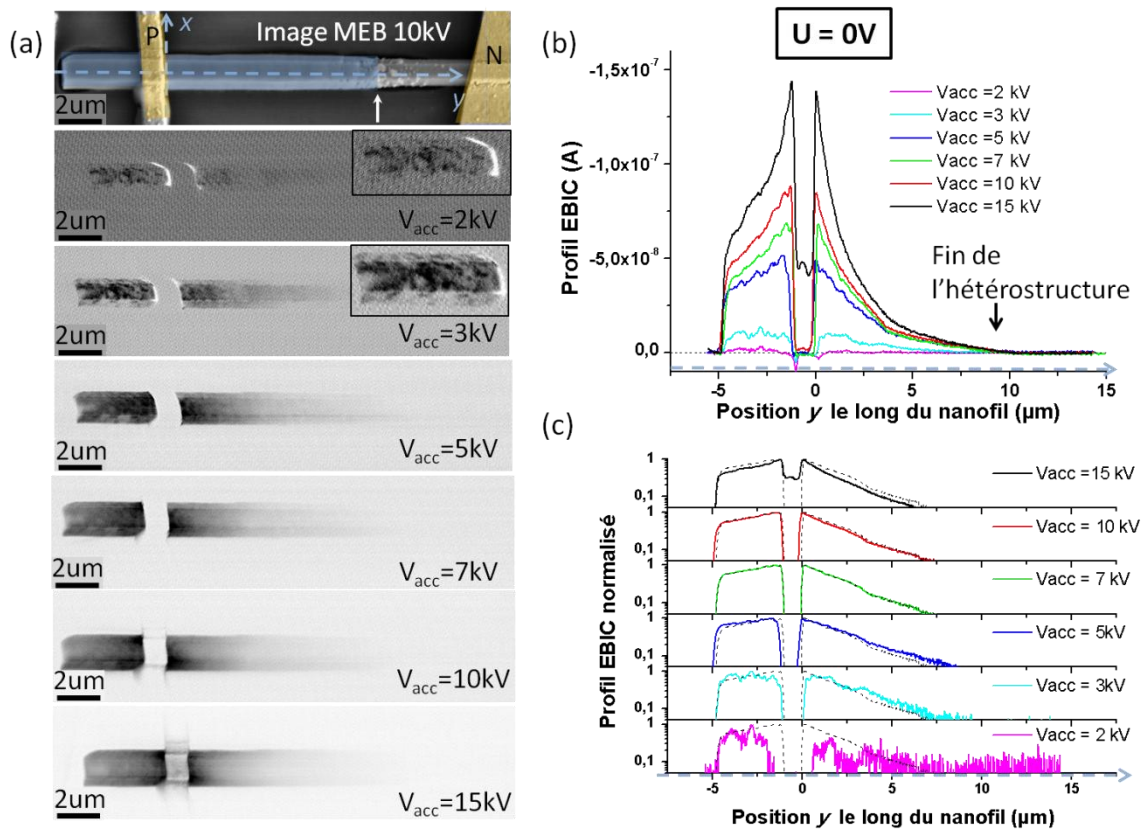
Une fois dissocié par le champ de la jonction p-n, les porteurs sont de type majoritaire : l'électron est balayé vers le côté de la jonction dopé n tandis que le trou est déplacé vers le côté dopé p. A cause de la résistance du cœur et de la coquille, l'efficacité de la collecte du courant généré par les contacts métalliques dépend de la distance entre la zone excitée et les contacts. En effet, en rejoignant les contacts, le courant peut partiellement se redistribuer dans la jonction. Ce phénomène est représenté par des traits en pointillé dans la Figure 48. Si l'on appelle  $\Gamma(x)$  l'efficacité de transport des porteurs générés à la position  $x$  (coordonnée selon l'axe du fil), définie comme le ratio entre le courant effectivement collecté par les contacts et le courant localement induit par la jonction p-n, le signal EBIC est alors donné par :

$$I_{EBIC}(x) = -I_{illum} \times \Gamma(x) = -qG \times \Sigma(x) \times \Gamma(x)$$

**Eq. 118**

Le signe moins provient de la convention de signe choisie pour le courant et les tensions.

La variation spatiale du courant EBIC contient donc à la fois des informations sur l'efficacité de collecte  $\Sigma$  de la jonction (i.e. effets liés aux porteurs minoritaires) et des informations sur l'efficacité de transport des porteurs majoritaires  $\Gamma$ . Comme nous le verrons plus loin, l'efficacité de transport  $\Gamma$  est généralement une fonction lentement variable qui décroît avec la distance au contact métallique. En revanche, l'efficacité de collecte  $\Sigma$  dépend des défauts locaux et peut donc présenter des variations locales rapides.



**Figure 55** (a) Image MEB (en haut) et cartographie EBIC mesurées en conditions de court-circuit ( $U=0\text{ V}$ ) pour des tensions d'accélération variant entre 2 et 15 kV. Les régions sombres correspondent aux zones générant le plus de signal EBIC. La flèche blanche sur l'image MEB indique la fin de l'hétérostructure cœur-coquille, qui est coloriée en bleu. Les contacts métalliques N et P sont en jaune. (b) Profils EBIC mesurés le long de la flèche en pointillée  $y$  montrée en (a). (c) Profils EBIC normalisés. La courbe en pointillée correspond au profil mesuré à  $V_{acc} = 7\text{ kV}$  qui a été superposé à toutes les courbes pour pouvoir les comparer.

## 2.3 Résultats expérimentaux

### 2.3.1 Influence de la tension d'accélération $V_{acc}$

Les cartographies EBIC et les profils correspondant mesurés le long de la direction  $y$  du fil pour une tension appliquée  $U = 0\text{ V}$  sur un nanofil et avec des tensions d'accélération  $V_{acc}$  variant entre 2 et 15 kV sont présentés dans la Figure 55. Les profils EBIC ont été obtenus en moyennant le signal EBIC dans la direction  $x$  sur la facette centrale du fil (facette sur laquelle le faisceau d'électrons arrive orthogonalement). L'image du haut obtenue en MEB à partir du signal d'électrons secondaires montre la région cartographiée en EBIC. Un signal EBIC est présent sur la partie supérieure du fil qui correspond à la région recouverte par la jonction p-n cœur-coquille. La position du contact Ni/Au sur la coquille dopée p est aisément visualisable en EBIC : étant donné que les électrons du faisceau sont fortement absorbés par le métal, quasiment aucun signal n'est généré dans la zone du fil recouverte par le contact. On remarque par ailleurs que les cartographies EBIC à faible tension d'accélération sont légèrement distordues en raison d'effets de charge provoquant un décalage de l'image au cours de l'acquisition.

A faible tension d'accélération, deux caractéristiques intéressantes sont à relever. La première est la présence de bandes claires, de part et d'autre du contact p, qui indiquent qu'un courant positif est généré, c'est-à-dire un courant de signe opposé à celui induit par la jonction p-n. Ce signal provient

vraisemblablement du caractère non-ohmique du contact p. En effet, le contact Ni/Au sur le p-GaN peut présenter une petite barrière Schottky qui fait apparaître une ZCE et un champ électrique au voisinage de l'interface entre le métal et le semi-conducteur. Ce champ électrique a un signe opposé à celui présent dans la ZCE de la jonction p-n. Lorsque la tension d'accélération augmente, les bandes claires disparaissent progressivement, ce qui indique que la contribution de la jonction p-n prend le pas sur celle du contact non ohmique.

Cette observation est en accord avec les simulations Monte Carlo réalisées avec le logiciel Casino [95] pour estimer la profondeur de la zone de génération des paires électrons-trous. Les résultats des simulations ont été présentés dans la section précédente et sont montrés dans la Figure 50d.

D'après la simulation, on constate que pour  $V_{acc} \leq 2 \text{ kV}$ , la génération de porteurs prend place principalement dans la zone neutre de la coquille externe de p-GaN. Dans ce cas, les porteurs générés près du contact peuvent diffuser soit vers la jonction p-n soit vers le contact de type Schottky. A 3 kV, la génération apparaît également dans la zone de déplétion de la jonction p-n. Au-delà de cette valeur, la plupart des porteurs sont générés dans le cœur de GaN non intentionnellement dopé. La simulation suggère donc que le signal provenant de la jonction p-n devrait être dominant pour des tensions d'accélération supérieures à 3 kV, en accord avec l'observation expérimentale. Par ailleurs, on peut remarquer sur la Figure 55 qu'à 15 kV un signal issu de la jonction p-n est observé sous le contact p, ce qui indique que la profondeur de pénétration du faisceau est plus grande que l'épaisseur du métal.

La seconde caractéristique à noter concernant les cartographies EBIC mesurées à faible tension d'accélération concerne l'inhomogénéité du signal. Bien que la surface du fil apparaisse lisse sur l'image MEB, les cartographies EBIC présentent des points noirs avec une dimension typique de l'ordre de 150 nm, indiquant une variation locale de l'efficacité de collecte  $\Sigma$ . Dans un nombre important d'expériences d'EBIC, les cartographies montrent des points « froids », c'est-à-dire des régions générant localement moins de courant et révélant la présence de pièges et de centres de recombinaison tels que des dislocations [72], [104]. Cependant, dans notre cas, on observe des points « chauds » correspondant à un accroissement local du signal EBIC. Ce phénomène est clairement observé sur les encarts des images EBIC à 2 et 3 kV dans la Figure 55 qui montrent un grossissement de la partie supérieure des fils. Une explication possible de cette caractéristique surprenante se fonde sur des observations similaires réalisées sur des jonctions Schottky en SiC avec un dopage de type n [104], [105]. Les points chauds ont été attribués à la présence de fautes d'empilement, qui se comportent comme des puits quantiques et capturent ainsi les électrons. Ces électrons diffusent le long de la faute d'empilement, conduisant lors de l'excitation par le faisceau d'électrons à une diminution de la concentration locale d'électrons à son voisinage. La faute d'empilement provoque ainsi une diminution locale du taux de recombinaison des paires électron-trou et donc un accroissement du temps de vie des trous et de leur longueur de diffusion, ce qui conduit à une augmentation du signal EBIC. Dans notre cas, des fautes d'empilements ont été observées en MET sur des hétérostructures InGaN/GaN cœur-coquille [36], [106]. Ces fautes d'empilement ont une direction orthogonale à l'axe du fil. Dans la référence mentionnée ci-dessus [105], la diode Schottky est réalisée à partir de SiC de type n. Dans le cas présent, le phénomène que l'on observe a lieu dans la coquille de GaN dopé p. On s'attend donc à ce que le mécanisme prédominant conduisant à une augmentation locale du signal EBIC ne soit pas l'augmentation de la

longueur de diffusion des trous mais plutôt l'amélioration de la collecte des électrons grâce à leur transport diffusif le long des fautes d'empilement.

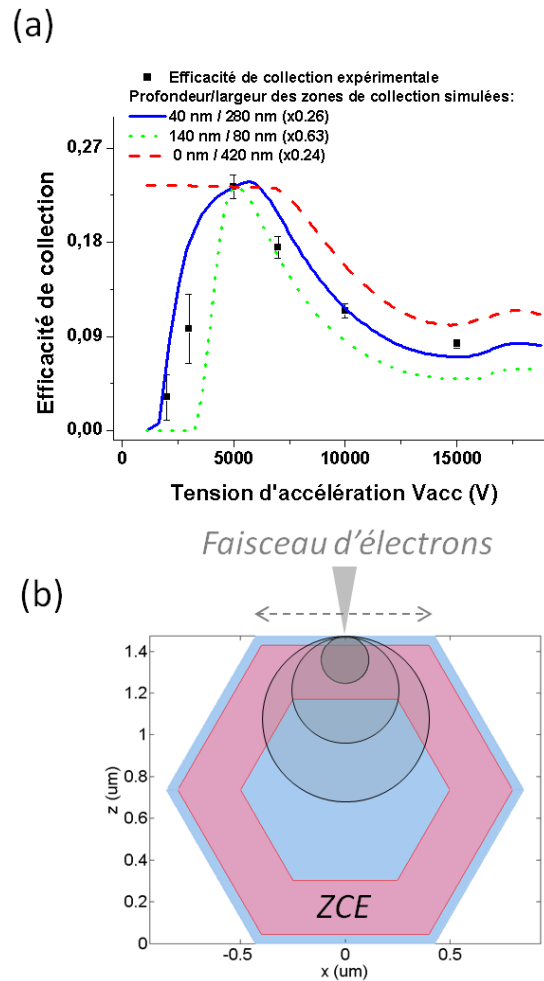
Par ailleurs, en plus du phénomène décrit ci-dessus, les puits quantiques d'InGaN pourraient jouer un rôle dans l'apparition des points chauds dans les cartographies EBIC. Cet effet supplémentaire serait alors semblable à ce qui a été observé dans des jonctions p-n planaires en silicium [75]. Les auteurs ont attribué l'augmentation locale du signal EBIC à la présence de sites de génération de micro-plasmas, en raison d'inhomogénéités structurales, à savoir un effet lié à la présence combinée de fautes d'empilement et de variations locales de la constante diélectrique  $\epsilon$  due à des inclusions de  $\text{SiO}_2$  ( $\epsilon_{\text{SiO}_2} < \epsilon_{\text{Si}}$ ) au sein de la ZCE de la jonction p-n. De façon similaire, la variation de la constante diélectrique pourrait provenir dans notre cas de régions localement plus riches en indium dans les puits quantiques d'InGaN [47]. Cependant, sachant que  $\epsilon_{\text{InGaN}} > \epsilon_{\text{GaN}}$ , les clusters riches en indium ont tendance à concentrer *en leur sein* les lignes du champ électrique de la jonction p-n et non pas *dans leur voisinage* comme c'est le cas avec les précipités de  $\text{SiO}_2$  [74]. L'augmentation du champ électrique qui en résulte peut créer des conditions propices à une avalanche locale. Les fautes d'empilement, qui sont susceptibles de piéger des charges, permettent par ailleurs d'amplifier et de verrouiller l'effet d'avalanche.

Lorsque la tension d'accélération augmente, les points chauds s'élargissent et disparaissent. L'accroissement de leur taille et la diminution de leur contraste lorsque  $V_{acc}$  augmente est probablement un effet de perte de résolution et donc de moyenne causé par l'élargissement du volume de génération : comme cela a été discuté dans la section précédente, l'élargissement latéral du volume de génération est du même ordre de grandeur que son extension verticale donnée par  $z_{max/e}$  qui augmente comme  $V_{acc}^{1.63}$  (cf. Eq. 102).

Intéressons nous désormais aux profils EBIC présentés dans la Figure 55. Afin de réduire le bruit, les profils ont été obtenus en sélectionnant une surface rectangulaire correspondant à la facette supérieure du fil couché et en moyennant suivant l'axe  $x$  le signal pour chaque position le long de l'axe  $y$ . La Figure 55b compare les profils EBIC, pour différentes tensions d'accélération  $V_{acc}$ , avec une échelle linéaire. La rugosité des profils provient des points chauds. Pour les tensions d'accélération élevées ( $V_{acc} \geq 5\text{ kV}$ ), le signal EBIC est maximal à proximité du contact p et décroît de part et d'autre du contact. A faible tension d'accélération ( $V_{acc} = 2 - 3\text{ kV}$ ), le comportement est différent. Tout d'abord, le signal change de signe au voisinage immédiat du contact en raison de son caractère légèrement Schottky comme cela a été discuté précédemment. Deuxièmement, le signal moyenné est quasiment constant pour les positions  $-5 < y < 2\text{ }\mu\text{m}$ , c'est-à-dire le long de  $2\text{ }\mu\text{m}$  sur la partie inférieure du fil et sur l'intégralité des  $5\text{ }\mu\text{m}$  de la partie supérieure. En se rapprochant de la fin de l'hétérostructure (c'est-à-dire pour  $y > 2\text{ }\mu\text{m}$ ), le signal décroît mais moins rapidement que pour les valeurs élevées de  $V_{acc}$ . L'accroissement progressif de la pente avec la tension d'accélération est clairement visible sur la Figure 55(c), qui montre les profils EBIC normalisés en échelles logarithmique. Le profil mesuré à  $V_{acc} = 7\text{ kV}$  est superposé à tous les profils pour pouvoir les comparer. Comme nous le verrons dans la section suivante, l'enveloppe constante du signal EBIC sur la partie supérieure du fil à  $V_{acc} = 3\text{ kV}$  suggère que l'efficacité de transport des porteurs majoritaires  $\Gamma(y)$  dans le cœur et la coquille est proche de 1. En revanche, lorsque la tension d'accélération augmente, le profil EBIC n'est plus constant sur la partie supérieure du fil, ce qui s'interprète comme une diminution de l'efficacité de transport, diminution qui est d'autant plus forte que l'on s'éloigne du contact. En effet, à cause de la résistance non nulle du cœur et de la coquille,

une partie du courant induit se redistribue dans les zones non excitées de la jonction radiale et est perdue par recombinaison radiative.

Si l'on compare désormais les niveaux de courant des profils EBIC dans la Figure 55(b), on constate que le signal généré par la jonction p-n augmente avec la tension d'accélération  $V_{acc}$  en accord avec l'équation Eq. 104 qui prédit un accroissement linéaire du taux de génération total  $G$  en fonction de  $V_{acc}$ . De façon plus quantitative, le taux de génération total  $G$ , calculé précédemment et présenté dans le Tableau 5 (page 95), peut être utilisé pour estimer le courant total  $I_{EBIC}$  que l'on devrait collecter dans le cas idéal où l'efficacité de collecte et de transport seraient égaux à 1 : cette grandeur égale à  $q \cdot G$  est présentée dans la dernière colonne du Tableau 5.



**Figure 56 (a) Efficacité de collecte de la jonction à  $U = 0$  V en fonction de la tension d'accélération. Les carrés noirs représentent les données expérimentales  $\Sigma_{exp}$ . Les courbes représentent l'efficacité de collecte simulée pour différentes épaisseur et profondeur de la zone de collection. (b) Schéma en coupe d'un fil. Le volume de génération est représenté par des cercles pour des valeurs de  $V_{acc}$  égales à  $\sim 5$ , 8 et 11 kV.**

L'efficacité de collecte expérimentale  $\Sigma_{exp}$  peut alors être estimée en calculant le ratio entre le courant mesuré près du contact et le courant  $I_{EBIC}$  présenté dans le Tableau 5. Ce calcul présuppose que, suffisamment près du contact, l'efficacité de transport tende vers 1. Il faut cependant remarquer que pour des tensions d'accélération élevées, cette hypothèse n'est pas nécessairement vérifiée. La grandeur  $\Sigma_{exp}$  n'est donc pas à proprement parler l'efficacité de collecte mais en fournit plutôt une borne inférieure.  $\Sigma_{exp}$  est tracée en fonction de la tension d'accélération dans la Figure

56(a) (points noirs). On constate que cette grandeur ne suit pas une évolution monotone en fonction de  $V_{acc}$ . Elle est assez faible à faible tension d'accélération (0.03 à 2 kV), augmente jusqu'à valoir 0.24 pour  $V_{acc} = 5$  kV puis diminue au-delà pour atteindre 0.08 à 15 kV. Comme le suggère l'équation Eq. 117, ce comportement reflète la variation du recouvrement entre le volume de génération  $\Omega_{gen}$  et le volume de la zone de collecte  $\Omega_{col}$ . Pour confirmer cette hypothèse, l'efficacité de collecte a été simulée avec un modèle géométrique simple illustré dans la Figure 56(b). Le taux de génération local de paires électron-trou  $g(r, z)$  a été supposé constant au sein d'une sphère (de façon similaire à ce qui a été fait dans les références [72], [76]). Le diamètre de la sphère dépend de la tension d'accélération et est choisi égal à  $d_e$  donné par l'équation Eq. 102 et tracé en fonction de  $V_{acc}$  dans la Figure 50(d). On a donc :

$$g(r, z) = \frac{G}{\frac{4}{3}\pi d_e^3}$$

**Eq. 119**

Les cercles représentés dans la Figure 56(b) correspondent à une coupe transversale des sphères de génération pour trois tensions d'accélération différentes lorsque le faisceau incident percute l'échantillon en  $x = 0$ , c'est-à-dire au milieu de la facette supérieure du fil. Etant donné que le diamètre de la sphère de génération n'est pas négligeable en comparaison du diamètre du fil, la géométrie 3D du fil doit être prise en compte. La section du fil est donc supposée hexagonale et son diamètre fixé, d'après des mesures MEB, à  $d_{fil} = 1.7 \mu m$ . La zone de collecte  $\Omega_{col}$  est représentée par la partie rose dans la Figure 56(b). Ses dimensions (*i.e.* sa largeur et sa distance à la surface du fil) sont considérées comme des paramètres ajustables. L'efficacité de collecte est calculée en utilisant l'équation Eq. 111 pour laquelle la recombinaison au sein de la ZCE et les effets de bords sont négligés. Etant donné que pour calculer les profils EBIC expérimentaux, le signal a été moyenné sur la facette supérieure du nanofil, la même procédure a été utilisée dans la simulation : l'efficacité de collecte a été calculée en prenant sa valeur moyenne lorsque le faisceau percute le fil entre les positions  $-\frac{d_{fil}}{4} < x < \frac{d_{fil}}{4}$ , ce qui est symbolisé sur la Figure 56 (b) par la flèche en pointillé.

Afin d'estimer la largeur de la zone de collecte, l'efficacité de collecte a été calculé en fonction de la tension d'accélération pour trois géométries différentes :

- i) une zone de collecte *identique* à la ZCE (c'est-à-dire avec une largeur de 280 nm et une distance à la surface du fil de 40 nm d'après la structure de bandes présentée dans la Figure 10 du chapitre 1)
- ii) une zone de collecte comprenant la ZCE *élargie* de 100 nm dans le cœur en n-i-d GaN et de 40 nm du côté de la coquille en p-GaN (*i.e.* jusqu'à la surface)
- iii) une zone de collecte comprenant la ZCE *réduite* de 100 nm à la fois du côté du cœur en n-i-d GaN et du côté de la coquille en p-GaN.

Les résultats des calculs sont tracés dans la Figure 56(a). Pour pouvoir comparer la tendance des courbes en fonction de la tension d'accélération, les données simulées ont été multipliées par une constante de façon à ce que les courbes s'intersectent toutes au point expérimental à 5 kV. Ces coefficients multiplicatifs sont donnés dans la Figure 56(a). Comme on peut le remarquer, ces derniers sont inférieurs à 1, ce qui signifie que l'efficacité de collecte expérimentale est inférieure à l'efficacité de collecte simulée. Une des raisons qui peut expliquer cet écart est le fait que l'on n'ait

pas pris en compte la recombinaison au sein de la ZCE. Dans ce cas, le facteur multiplicatif correspond au terme  $\langle \Delta w \rangle / w$  apparaissant dans l'équation Eq. 117, c'est-à-dire la fraction moyenne de la largeur de la ZCE traversée par les porteurs de charges avant qu'ils ne se fassent piéger ou se recombinent. Si l'on considère par exemple le premier calcul, le facteur multiplicatif vaut 0.26, ce qui suggère que les porteurs parcourent en moyenne  $0.26 \times 280 \text{ nm} = 73 \text{ nm}$  au sein de la ZCE avant d'être capturés. Les deux autres calculs donnent respectivement des valeurs égales à 67.2 nm ( $0.24 \times 280 \text{ nm}$ ) et 50 nm ( $0.63 \times (280 - 2 \times 100)$ ). Cette interprétation du facteur multiplicatif doit cependant être considérée avec beaucoup de précaution, étant donné la simplicité du modèle utilisé : les effets de bords liés à la dimension finie du volume de génération mais aussi du nanofil (recombinaison de surface) ne sont notamment pas pris en compte dans le modèle et tendent à diminuer l'efficacité de collecte de la jonction.

Lorsque l'on compare les données expérimentales d'efficacité de collecte de la jonction et les courbes simulées, on constate que le meilleur fit est obtenu lorsque l'on suppose que la zone de collecte est identique à la ZCE. Afin de confirmer ce résultat, une autre approche a été utilisée : les profils EBIC mesurés perpendiculairement à l'axe du fil ont été mesurés puis comparés aux profils simulés. Les profils normalisés sont montrés dans la Figure 57. Afin de réduire le bruit, les profils expérimentaux ont été obtenus en sélectionnant une surface rectangulaire couvrant la partie supérieure du fil (*i.e.* du contact p jusqu'au sommet du fil) et en moyennant le signal pour chaque position perpendiculaire à l'axe du fil. Les profils simulés sont obtenus en calculant l'efficacité de collecte en fonction de la position  $x$  à laquelle le faisceau d'électrons atteint la surface de l'échantillon, comme illustré dans la Figure 57(b). La zone de collecte est supposée identique à la ZCE. Les tendances prédites par la simulation sont en bon accord avec les profils expérimentaux. A  $V_{acc} = 2 \text{ kV}$ , la simulation prédit qu'aucun signal ne devrait être observé sur les facettes latérales. C'est effectivement ce que l'on observe expérimentalement dans la cartographie EBIC (Figure 55) ainsi que sur le profil EBIC (Figure 57). Le signal apparaît sur les facettes latérales à 3 kV comme prédit. Le signal associé aux facettes latérales augmente ensuite avec la tension d'accélération jusqu'à dépasser le signal provenant de la facette supérieure pour des tensions d'accélération supérieures à 7 kV. Les bosses simples et doubles observés à  $V_{acc} = 7 \text{ kV}$  et  $V_{acc} \geq 10 \text{ kV}$  dans les profils sont aussi en accord avec la simulation. Par exemple, l'épaule simple à 7 kV est clairement observé dans la cartographie EBIC de la Figure 55 ainsi qu'une forte augmentation du signal à la limite entre la facette supérieure et les facettes latérales. La comparaison entre les profils EBIC latéraux mesurés et simulés confirme donc la validité du modèle de simulation ainsi que la conclusion à laquelle nous sommes parvenus précédemment concernant l'extension de la zone de collecte des porteurs.

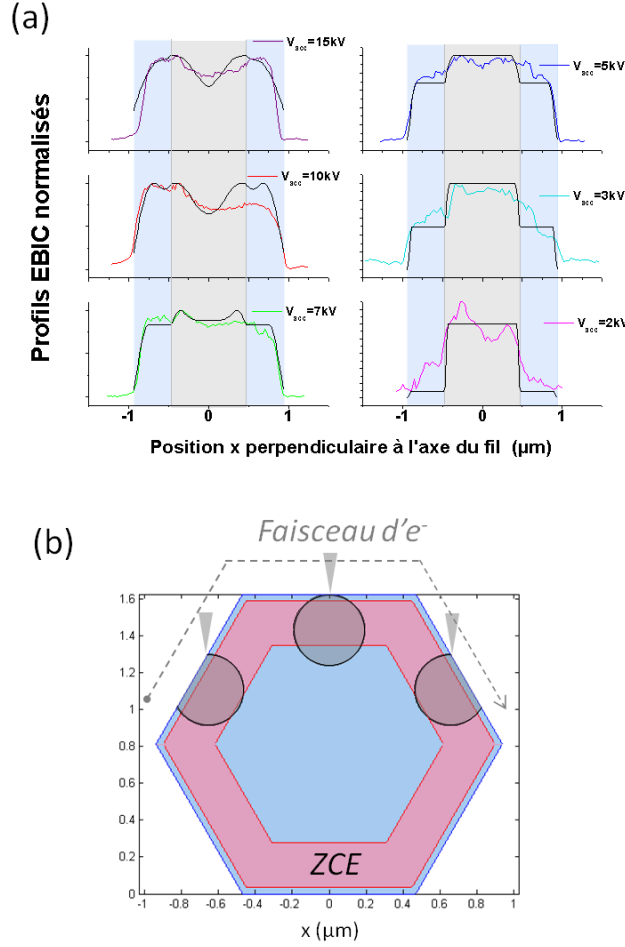
Le bon accord entre les données expérimentales et les simulations indique que les porteurs générés en dehors de la ZCE ne sont pas collectés efficacement. Ce résultat laisse donc penser que la longueur de diffusion des électrons (trous) dans le p-GaN (n-i-d GaN) est négligeable devant la largeur de la ZCE. Cependant, cette conclusion, bien que plausible, n'est pas nécessairement valable étant donné qu'elle ne prend pas en compte deux caractéristiques spécifiques à la structure étudiée. Tout d'abord, d'après le calcul de la structure de bandes présenté dans la Figure 10, une partie importante de la coquille de p-GaN est déplétée. L'épaisseur de la zone neutre résiduelle dans la coquille de p-GaN est petite ( $\sim 40 \text{ nm}$ ) en comparaison de la longueur de diffusion des électrons qui est généralement comprise entre 0.1 et 1  $\mu\text{m}$  [60], [61], [107]. Par conséquent, les recombinaisons de surface doivent jouer un rôle significatif : la surface du fil « attire » alors les porteurs générés dans la zone neutre de la coquille de p-GaN en induisant un courant de diffusion. Il y a donc une



compétition entre la jonction p-n et la surface pour la collecte des porteurs générés dans la région neutre. La distance depuis le bord de la ZCE jusqu'à laquelle la jonction collecte efficacement les porteurs n'est donc plus déterminée par la longueur de diffusion des électrons mais plutôt par la force relative des courants de diffusions induits par la jonction et par la surface<sup>16</sup>. Il semblerait donc que la surface capte plus efficacement les porteurs que la jonction p-n. Pour ce qui est la longueur de diffusion des trous dans le cœur de GaN n-i-d, les valeurs rapporté dans la littérature sont de l'ordre de quelques centaines de nanomètres [60]–[63]. On aurait pu donc s'attendre à avoir une extension de la zone de collecte plus importante à l'intérieure du cœur de GaN. Cependant, comme cela a été noté précédemment, la région active du dispositif contient des puits quantiques situés dans une région avec un champ électrique modéré (voir Figure 1d)). De plus, les puits quantiques contiennent une densité importante d'électrons. Les trous qui diffusent du cœur de GaN vers la jonction peuvent donc être capturés par les puits avant d'avoir traversé la ZCE. La collecte médiocre des porteurs générés dans le cœur du fil suggèrerait donc plutôt que la capture par les puits quantiques est efficace.

---

<sup>16</sup> Ainsi, avec un modèle très simple qui suppose que la vitesse de recombinaison de surface est infinie et que les porteurs qui atteignent le bord de la jonction sont immédiatement collectés, on montre ainsi que la zone de collection de la jonction ne s'étend pas d'une distance  $L$  égale à la longueur de diffusion des porteurs minoritaires mais plutôt de  $L \times th(\frac{d_{ZCE}}{2L})$  où  $d_{ZCE}$  est la profondeur de la ZCE par rapport à la surface et  $th$  représente la fonction tangente hyperbolique. On vérifie que  $th(\frac{d_{ZCE}}{2L})$  tend vers 1 quand  $d_{ZCE}$  tend vers  $+\infty$ . A l'inverse, quand  $d_{ZCE}$  tend vers 0,  $L \times th(\frac{d_{ZCE}}{2L})$  devient équivalent à  $\frac{d_{ZCE}}{2}$  : cela signifie que la moitié des paires générées dans la coquille est collectée par la jonction et l'autre moitié se recombinaient à la surface. (voir annexe F pour plus de détails)



**Figure 57 (a) Comparaison entre les profils EBIC expérimentaux (courbes en couleur) et les profils simulés (courbes noires). Les profils sont mesurés le long de la direction perpendiculaire à l'axe du fil pour des tensions d'accélération variant entre 2 et 15 kV. La position des facettes du fil est indiquée par les rectangles colorés. Les profils sont simulés à l'aide du modèle schématisé dans la figure (b). (b) Schéma d'une section transverse d'un fil. L'efficacité de collecte est égale au recouvrement entre la zone de collecte et la zone de génération. Des coupes transverses des sphères de génération sont représentées pour trois différentes positions du faisceau d'électron.**

Il convient de noter que la diminution du taux de génération total lié à l'augmentation du coefficient de rétrodiffusion lorsque le faisceau d'électron balaye les facettes inclinées du fil est indirectement prise en compte dans la simulation des profils EBIC latéraux. En effet, le taux de génération local est supposé constant au sein de la sphère de génération. Lorsque le faisceau d'électron frappe la surface incliné du fil, la sphère de génération n'est pas entièrement confinée à l'intérieur du fil (voir Figure 57). Le taux de génération total, qui est égal au taux de génération local  $g$  multiplié par le volume du recouvrement entre la sphère et le fil, est donc plus faible que dans le cas de l'incidence normale. Plus précisément, lorsque le faisceau heurte une surface inclinée de  $60^\circ$  correspondant à une facette latérale du fil, le volume du recouvrement entre la sphère de génération et le fil est égal à 0.84 fois le volume de la sphère, ce qui signifie que dans la simulation des profils EBIC latéraux, le taux de génération total sur une facette latérale  $G_{\text{facette latérale}}$  est donné par :

$$G_{\text{facette latérale}} = 0.84 G$$

**Eq. 120**

où  $G$  correspond au taux de génération total à incidence normal, donné par l'équation Eq. 104. Cette valeur est en relativement bon accord avec les valeurs calculées dans la section précédente et recopié à partir Tableau 7 dans la deuxième colonne du Tableau 8. La troisième colonne correspond à l'erreur relative qui découle de l'utilisation de l'équation Eq. 120 dans la simulation des profils latéraux. Le taux de génération sur les facettes latérales est légèrement surestimé d'un facteur inférieur à 0.1 % à 2 kV puis qui augmente jusqu'à 9.1 % à 15 kV.

**Tableau 8 Colonne 2 : Variation relative du taux de génération pour une facette inclinée de 60 ° par rapport au cas de l'incidence normale déterminé par simulations Monte-Carlo avec le logiciel Casino. Colonne 3 : écart entre le taux de génération utilisé dans la simulation des profils EBIC latéraux et le taux de génération prédit par simulation Monte-Carlo.**

Tension d'accélération (kV)	Ratio $G_{60^\circ}/G_{0^\circ}$ calculé avec Casino	Ecart entre le ratio $G_{60^\circ}/G_{0^\circ}$ utilisé dans la simulation des profils latéraux et celui calculé avec Casino (%)
2	0.84	<0.1
3	0.82	+2,4
5	0.80	+5,0
7	0.79	+6,3
10	0.78	+7,7
15	0.77	+9,1

### 2.3.2 Influence de la polarisation inverse de la jonction ( $U < 0$ )

L'évolution du signal EBIC en fonction de la tension  $U$  appliquée entre les contacts a été étudiée à faible (3 kV) et haute (15 kV) tension d'accélération  $V_{acc}$ .

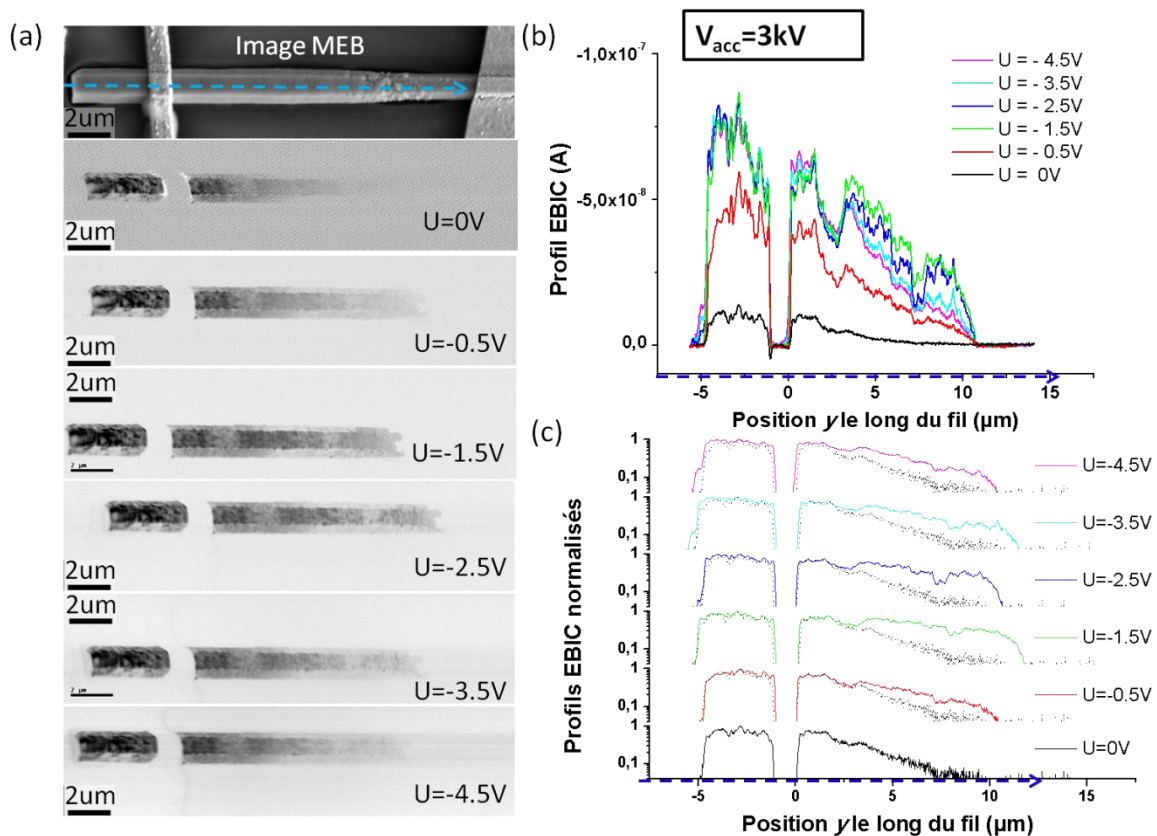
Les cartographies EBIC et les profils correspondant mesurés à  $V_{acc} = 3$  kV pour des tensions  $U$  variant entre 0 et -5 V sont montrés dans la Figure 58. Lorsque la tension  $U$  augmente en valeur absolue, les bandes claires de chaque côté du contact p disparaissent, ce qui confirme leur attribution à la présence d'un champ électrique généré par le caractère légèrement Schottky du contact. En effet, la ZCE de la jonction Schottky est supposée se contracter jusqu'à disparaître pour des tensions  $U$  négatives. Par ailleurs, on peut remarquer que l'intensité des points chauds augmente et que ces derniers s'élargissent. Cette observation est compatible avec leur attribution au phénomène d'avalanche locale : puisque le champ électrique de la jonction p-n augmente en polarisation inverse, les régions pour lesquelles le champ est suffisamment élevé pour provoquer un phénomène d'avalanche stable sont plus importantes. Enfin, aucun signal n'est observé quelle que soit la tension appliquée sur la partie sans jonction p-n radiale. Il y a une transition abrupte à la fin de l'hétérostructure cœur-coquille qui est clairement observable sur les cartographies mesurées à  $U = -1.5$  V et  $-2.5$  V. On peut donc en conclure que les paires électron-trou générées dans le pied du fil constitué de GaN fortement dopé de type n se recombinent avant de diffuser jusqu'à la jonction p-n. Dans le GaN suffisamment dopé n pour qu'il soit dégénéré, la longueur de diffusion des trous doit en effet être beaucoup plus faible que dans le GaN faiblement dopé.

Les profils EBIC pour différentes tensions  $U$  sont montrés dans la Figure 58 (b). On constate que le courant augmente en valeur absolue dans toute les régions lorsque le fil est polarisé négativement jusqu'à -1.5 V. Au-delà de -1.5 V, le courant sature dans la partie supérieure du fil et décroît légèrement dans sa partie inférieure. L'accroissement du signal dans la partie supérieure du fil ne

peut pas être dû à l'augmentation de l'efficacité du transport par le cœur et la coquille, celle-ci étant déjà proche de 1 à 0 V comme cela a été discuté précédemment. Cela signifie que le courant généré par la jonction augmente. Cet effet provient probablement de l'amélioration de l'efficacité de collecte. Or, seuls les porteurs générés dans la ZCE sont collectés et cela pour plusieurs raisons possibles (faible longueur de diffusion des porteurs minoritaires comme ça peut être le cas par exemple dans les photodiodes p-i-n à base de nitrure en couche mince [108], recombinaison de surface, capture par les puits quantiques). Lorsque la jonction est polarisée en inverse, la ZCE s'élargit et le courant induit augmente. La saturation du signal apparaît lorsque la ZCE devient plus large que la profondeur d'excitation, qui est relativement faible à 3 kV. De plus, l'élargissement de la ZCE diminue la concentration d'électrons dans les puits quantiques et l'augmentation du champ électrique favorise l'extraction des porteurs capturés. Enfin, le renforcement du phénomène d'avalanche peut également contribuer à l'augmentation du signal pour les tensions négatives.

On peut remarquer que les profils EBIC tracés dans la Figure 58(b) présentent pour toutes les tensions un creux autour de  $y = 2.5 \mu m$  qui n'est en revanche pas observé à  $V_{acc} = 15 kV$ . Par conséquent, il n'est pas la signature d'une propriété structurale interne du fil mais provient plutôt d'une contamination de surface, le signal EBIC à faible tension d'accélération étant fortement sensible à l'état de surface de l'échantillon.

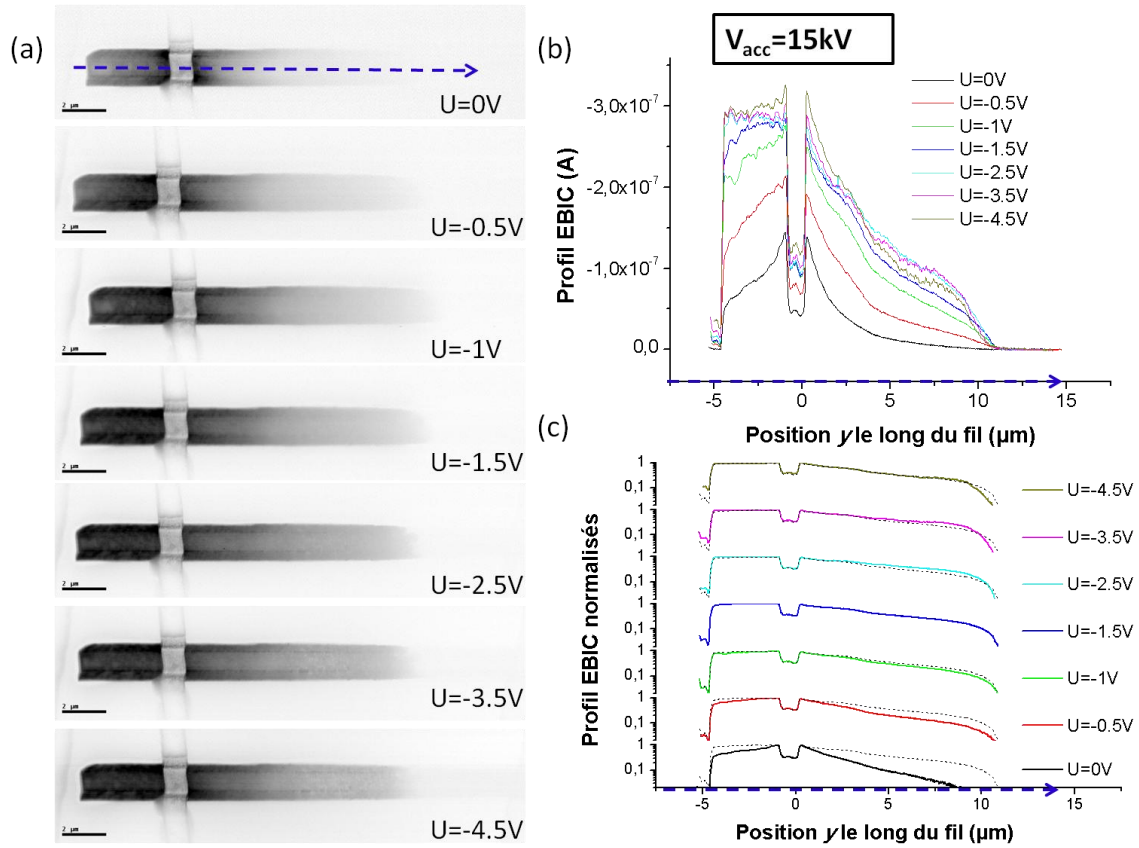
Pour mettre en évidence le changement de pente des profils EBIC près de la fin de l'hétérostructure cœur-coquille, les profils normalisés sont montrés dans la Figure 58(c). Le profil mesuré à 0 V est superposé à tous les profils. Comme on peut le remarquer, les changements des profils avec la tension appliquée ont lieu principalement dans la partie inférieure du fil : l'efficacité de transport augmente de façon significative dans cette région lorsque le dispositif est polarisé en inverse. Comme cela sera montré dans la suite, ce phénomène est une conséquence de la non-linéarité de la caractéristique courant-tension de la jonction p-n. En effet, la résistance équivalente de la jonction (*i.e.* le rapport entre la tension à ses bornes et le courant qui la traverse) augmente lorsque la jonction est polarisée en inverse. Par conséquent, la redistribution du courant à travers la jonction diminue et l'efficacité de transport augmente. Cependant, lorsque la tension décroît de -1.5 V à -4.5 V, cet effet est compensé dans la partie inférieure du fil par un autre phénomène provoquant une légère diminution du signal EBIC. Cela pourrait être la conséquence de l'élargissement de la ZCE de la jonction p-n lorsque celle-ci est polarisée en inverse. L'élargissement de la ZCE du côté p provoque une diminution du volume de conduction de la coquille. Etant donné que la région non déplétée de la coquille est fine à 0 V (40 nm, cf. Figure 10), la réduction de son volume de conduction peut engendrer une augmentation importante de sa résistance, ce qui conduit à une redistribution du courant dans la jonction plus importante et donc à une efficacité de transport plus faible.



**Figure 58** (a) Image MEB à 10 kV obtenue en imagerie par électrons secondaires et cartographie EBIC mesurées à 3 kV pour différentes tensions  $U$  appliquées entre les contacts du fil. (b) Profils EBIC mesurés le long de la flèche en pointillée en (a). (c) Profils EBIC normalisés. La courbe en pointillée correspond au profil mesuré à  $U = 0 V$  qui est superposé pour pouvoir les comparer.

Les mesures EBIC réalisées à  $V_{acc} = 15 kV$  sont présentés dans la Figure 59. Les tendances sont semblables à celles observées à 3 kV. Le signal EBIC augmente avec la tension mais cette fois, l'augmentation a lieu jusqu'à  $U = -4.5 V$ . En effet, la profondeur d'excitation est bien plus grande à 15 kV qu'à 3 kV : la ZCE reste moins large que la profondeur d'excitation sur la plage de tension étudiée. Ainsi, alors qu'elle atteint son maximum autour de  $-1.5 V$  à 3 kV, l'efficacité de collecte augmente jusqu'à des tensions de  $-4.5 V$  à 15 kV.

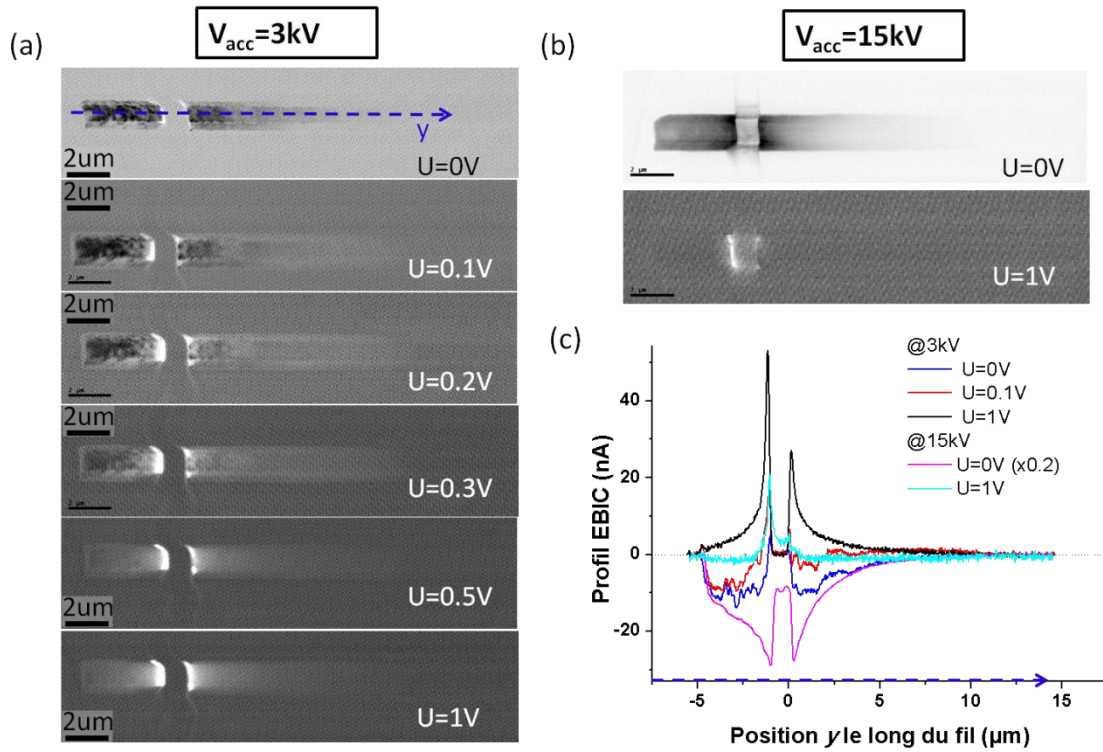
Tout comme à 3 kV, on observe à 15 kV un changement de pente des profils en fonction de la tension appliquée lorsque l'on s'éloigne du contact p : cela traduit l'augmentation de l'efficacité de transport dans le cœur et dans la coquille. Cependant, cette fois, l'amélioration est observable des deux côtés du contact p. L'augmentation de l'efficacité de collecte entre  $-1.5$  et  $-3.5 V$  contrebalance probablement la diminution de l'efficacité de transport mise en évidence à 3 kV. Cela pourrait expliquer que le signal dans la partie la plus inférieure du fil ne décroît qu'à partir de  $-3.5 V$ .



**Figure 59** (a) Cartographie EBIC mesurés à 15 kV pour différentes tensions  $U$  appliquées aux bornes du fil. Les barres noires en bas à gauche des images correspondent à une distance de 2  $\mu m$ . (b) Profils EBIC mesurés le long de la flèche en pointillé tracée dans la figure (a). (c) Profils EBIC normalisés. A titre de comparaison, le profil mesuré pour  $U = -1.5 V$  est superposé à tous les profils.

### 2.3.3 Influence de la polarisation directe de la jonction ( $U > 0 V$ )

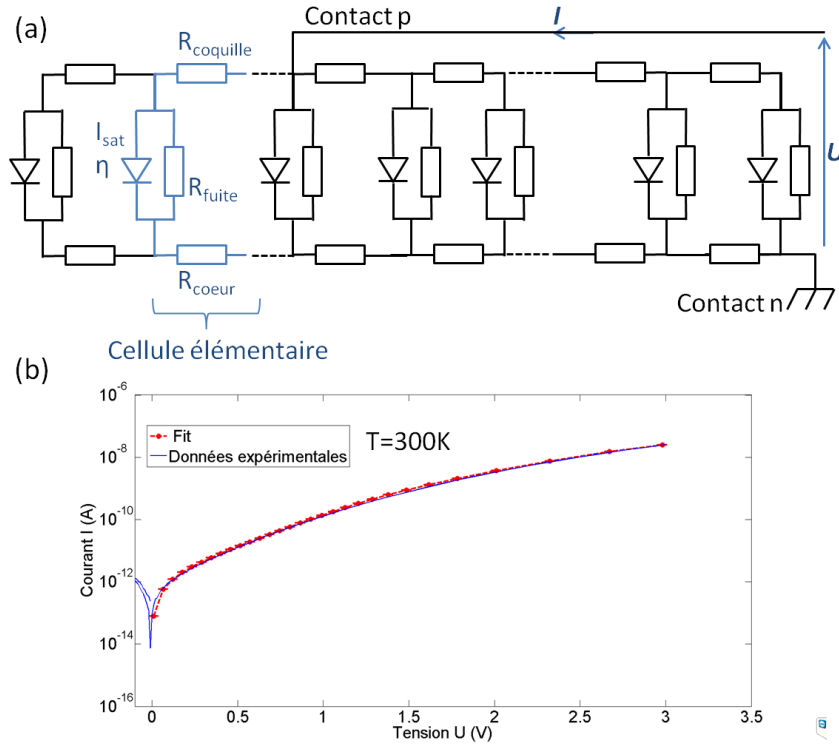
Les cartographies et les profils EBIC mesurés à  $V_{acc} = 3 kV$  et  $15 kV$  pour des tensions  $U$  variant entre 0 V et 1 V sont montrés dans la Figure 60. Pour les deux tensions d'accélération, on constate que le signal de la jonction p-n décroît lorsque la tension  $U$  augmente. Comme attendu, cela provient de la diminution de l'efficacité de transport et l'efficacité de collecte: en effet, la résistance équivalente de la jonction p-n chute lorsqu'elle est polarisée en direct, provoquant ainsi une redistribution du courant collecté plus importante. De plus, le champ électrique et la taille de la ZCE de la jonction p-n diminuent. Par conséquent, le volume de la zone de collecte se réduit, la dissociation des paires électron-trou devient moins efficace, la recombinaison radiative dans les puits quantiques au contraire augmente alors que l'extraction des porteurs devient plus difficile. Le signal de la jonction p-n disparaît complètement pour une tension d'environ 1 V, ce qui peut paraître faible en comparaison de la valeur de l'énergie de bande interdite du GaN (3.41 eV à 300 K). Cela pourrait être une conséquence de la capture efficace des trous par les puits quantiques qui réduisent fortement l'extraction des porteurs de la ZCE. A 3 kV, le signal correspondant aux bandes claires sur la coquille, de part et d'autre du contact, s'intensifie lorsque la tension  $U$  augmente en raison de l'élargissement de la ZCE associée au caractère Schottky du contact. Les mêmes bandes claires apparaissent à 15 kV lorsque l'on polarise en direct la jonction. En effet, lorsque le signal de la jonction p-n disparaît, le signal de la Schottky devient visible, même s'il est moins prononcé qu'à  $V_{acc} = 3 kV$ .



**Figure 60 (a) Cartographies EBIC mesurées à  $V_{acc} = 3 \text{ kV}$  pour différentes tensions  $U$ . (b) Cartographies EBIC mesurées à  $V_{acc} = 15 \text{ kV}$  pour  $U = 0 \text{ V}$  et  $U = 1 \text{ V}$ . (c) Profils EBIC le long de la flèche en pointillé de la figure (a).**

Cependant, malgré ces similitudes, on remarquera que les comportements à faible et forte tension d'accélération sont quelque peu différents à  $U = 1 \text{ V}$ . Un nouveau phénomène est en effet observé : à  $V_{acc} = 3 \text{ kV}$ , un courant induit *positif* est observé tout le long du fil. Lorsque la tension  $U$  augmente, le signal positif apparaît tout d'abord sur la partie la plus inférieure du fil puis s'étend vers le contact p. Ce phénomène n'est pas observé à  $15 \text{ kV}$  : le signal EBIC est nul sur l'ensemble du fil, excepté dans la région du contact Schottky. On pourrait attribuer cet effet au caractère légèrement Schottky du contact. Cependant, il semble peu probable que les porteurs minoritaires puissent diffuser ou dériver le long des  $10 \mu\text{m}$  de la coquille jusqu'au contact sans recombiner. Une hypothèse plus convaincante suppose que la résistance de la coquille est abaissée localement sous l'effet de l'excitation du faisceau. La modulation de conductance des nanofils est un phénomène bien connu [109] qui peut conduire à des gains photoconducteur allant jusqu'à  $10^8$  [110]. Le même phénomène peut se produire avec une excitation par un faisceau d'électrons. Il s'explique par une modulation de la structure de bandes à proximité de la surface du fil. En effet, les états de surface induisent une densité de charge surfacique. Le champ électrique créé par celle-ci est écranté dans le semi-conducteur grâce à l'apparition d'une zone de déplétion, ce qui se traduit par une courbure de la structure de bandes dans la direction perpendiculaire à la surface. Les porteurs minoritaires générés diffusent préférentiellement vers leur minimum de potentiel et ont donc naturellement tendance à se faire piéger à la surface : cela diminue la charge surfacique, ce qui provoque une réduction de la taille de la zone de déplétion et augmente par conséquent le volume utile de conduction. Le retour à l'équilibre des porteurs piégés peut être très lent, avec des temps caractéristiques de plusieurs secondes [111]. Dans notre cas, étant donné que la partie non déplétée de la coquille de p-GaN est fine ( $\sim 40 \text{ nm}$ ), l'excitation par le faisceau d'électron peut provoquer une diminution locale significative de la résistance de la coquille, induisant alors un accroissement du courant. La modulation de résistance de la coquille devrait être plus grande à faible tension

d'accélération étant donné que, dans ce cas, la génération de porteur a lieu quasiment intégralement dans la coquille de p-GaN. Cela expliquerait alors pourquoi un signal positif est observé à 3 kV alors qu'il est absent à 15 kV. La modulation a lieu par ailleurs dans la région directement excitée par le faisceau d'électrons (dont l'extension est d'environ une centaine de nanomètre à 3 kV) et s'étend sur les bords sur une distance typique pouvant aller jusqu'à la longueur de diffusion des porteurs minoritaires.



**Figure 61 (a) Circuit électrique équivalent correspondant à un fil contacté. (b) Caractéristique courant-tension (I-V) d'un fil dans l'obscurité. La courbe en trait plein correspond aux mesures expérimentales et la courbe en pointillé est issue de la simulation. Les paramètres de chacune des 100 cellules élémentaires utilisés dans le calcul de la courbe ajustée sont les suivants :  $I_{sat} = 1.2 \times 10^{-14} A$  ;  $\eta = 7.925$  ;  $R_{coquille} = 6 \times 10^6 \Omega$  ;  $R_{coeur} = 1 \times 10^5 \Omega$  ;  $R_{fuite} = 5 \times 10^{13} \Omega$ .**

### 3 Modélisation des propriétés de transport des porteurs majoritaires

Afin d'analyser les profils EBIC expérimentaux et pour comprendre l'influence de certains paramètres clefs sur les images EBIC, le transport des porteurs au sein du fil a été simulé en utilisant le code numérique que j'ai développé. L'approche utilisée pour calculer le transport des porteurs est décrite dans la Figure 61 et analysée plus en détails dans l'annexe II-A. Elle consiste à discrétiser le fil le long de son axe en petits segments constituant des cellules élémentaires qui sont modélisées par un circuit électrique équivalent. La distribution du courant généré dans le réseau électrique obtenu est ensuite calculée. Une cellule élémentaire consiste en deux résistances  $R_{coeur}$  et  $R_{coquille}$  qui sont reliées à une diode.  $R_{coeur}$  et  $R_{coquille}$  prennent en compte le transport dans chaque segment le long du cœur de n-GaN et de p-GaN respectivement. La diode modélise la jonction p-n et est décrite par son courant de saturation  $I_{sat}$  et son facteur d'idéalité  $\eta$ . Afin de décrire la jonction de façon plus réaliste, les courants de fuite parasites liés par exemple à des défauts ponctuels dans la jonction p-n



ou à des dislocations ont été pris en compte en introduisant une résistance de fuite  $R_{fuite}$  en parallèle de la diode.

Il faut noter qu'une description plus rigoureuse de la génération du courant et de son transport requerrait un modèle tridimensionnel puisque les six facettes du fil ne sont pas excitées de la même façon et que le contact sur la coquille n'a pas de symétrie de révolution par rapport à l'axe du fil. Cependant pour des raisons de simplicité et de facilité de calcul, on fait l'hypothèse que chaque segment est représenté par une diode équivalente qui prend en compte l'ensemble des six facettes et l'on étudie uniquement la variation du courant le long de l'axe du fil. Cette approche a l'avantage d'être intuitive et souple, ce qui est nécessaire pour analyser les résultats expérimentaux.

Lorsqu'une diode d'une cellule élémentaire est polarisée par une tension  $U_d$  à ses bornes, un courant  $i_d$ , donné par l'équation suivante, la traverse :

$$i_d = I_{sat} \left( \exp \left( \frac{qU_d}{\eta k_b T} \right) - 1 \right),$$

**Eq. 121**

En présence de l'excitation par le faisceau d'électron, un courant supplémentaire  $I_{illum}$  est généré par la jonction p-n. L'équation Eq. 121 devient alors :

$$i_d = I_{sat} \left( \exp \left( \frac{qU_d}{\eta k_b T} \right) - 1 \right) - I_{illum},$$

**Eq. 122**

Pour simuler les profils EBIC, on considère d'abord qu'une seule diode est excitée puis l'on calcule le courant dans chaque cellule élémentaire et le courant total  $I$  qui traverse les contacts. Le profil EBIC est obtenu en traçant la différence entre le courant total sous excitation et sans excitation en fonction de la position du faisceau d'électron. Lorsque le courant présente des variations locales importantes, comme c'est le cas par exemple lorsque la forte résistivité de la coquille induit une redistribution du courant généré dans la jonction p-n, un maillage plus fin est utilisé. En particulier, dans ce cas, la région excitée est également discrétisée en plusieurs cellules élémentaires et plusieurs diodes sont excitées.

Tout d'abord, les valeurs des paramètres du modèle ( $R_{core}$ ,  $R_{shell}$ ,  $I_{sat}$  etc.) ont été estimés en ajustant la courbe courant tension (I-V) du fil étudié mesurée à température ambiante dans l'obscurité. L'ajustement de la courbe a été réalisé en utilisant le modèle décrit dans la Figure 61 composé de 100 cellules élémentaires avec des paramètres identiques. La procédure d'ajustement a consisté à changer de façon itérative chaque paramètre et à comparer les courbes simulée et expérimentale. Le meilleur fit est montré dans la Figure 61(b). Les paramètres utilisés pour l'ajustement sont indiqués dans la légende. On constate un bon accord entre la courbe ajustée et les données expérimentales.

Avant d'analyser les profils EBIC et dans l'objectif d'acquérir de l'intuition pour l'analyse EBIC, l'influence des paramètres clefs ( $R_{coquille}$ ,  $I_{illum}$ ,  $U$ ,  $R_{coeur}$ ,  $R_{fuite}$ , fuite ponctuelle) sont étudiés.

### 3.1 Influence de la résistance de la coquille

L'évolution des profils EBIC pour des résistances de coquille variant entre  $10^6$  et  $10^9 \Omega$  sont présentés dans la Figure 62(a). Le système simulé contient 100 cellules élémentaires identiques. Les paramètres des diodes ( $I_{sat}$  et  $\eta$ ) sont fixés aux valeurs trouvées précédemment à partir de la courbe ajustée. Les régions excitées contiennent 10 cellules élémentaires et le courant d'illumination est fixé à 1 nA. Afin d'éviter son influence, la résistance du cœur  $R_{cœur}$  est choisie nulle. Dans ce cas, le profil EBIC est symétrique de part et d'autre du contact p. Pour cette raison, dans la Figure 62(a), seul un côté est représenté, l'axe x correspondant à la distance au contact p. De même, afin d'éliminer l'effet du à la résistance de fuite,  $R_{fuite}$  est fixé à une valeur infinie<sup>17</sup>. Les paramètres du système simulé ainsi que de tous les autres systèmes simulés par la suite sont résumés dans le Tableau 9.

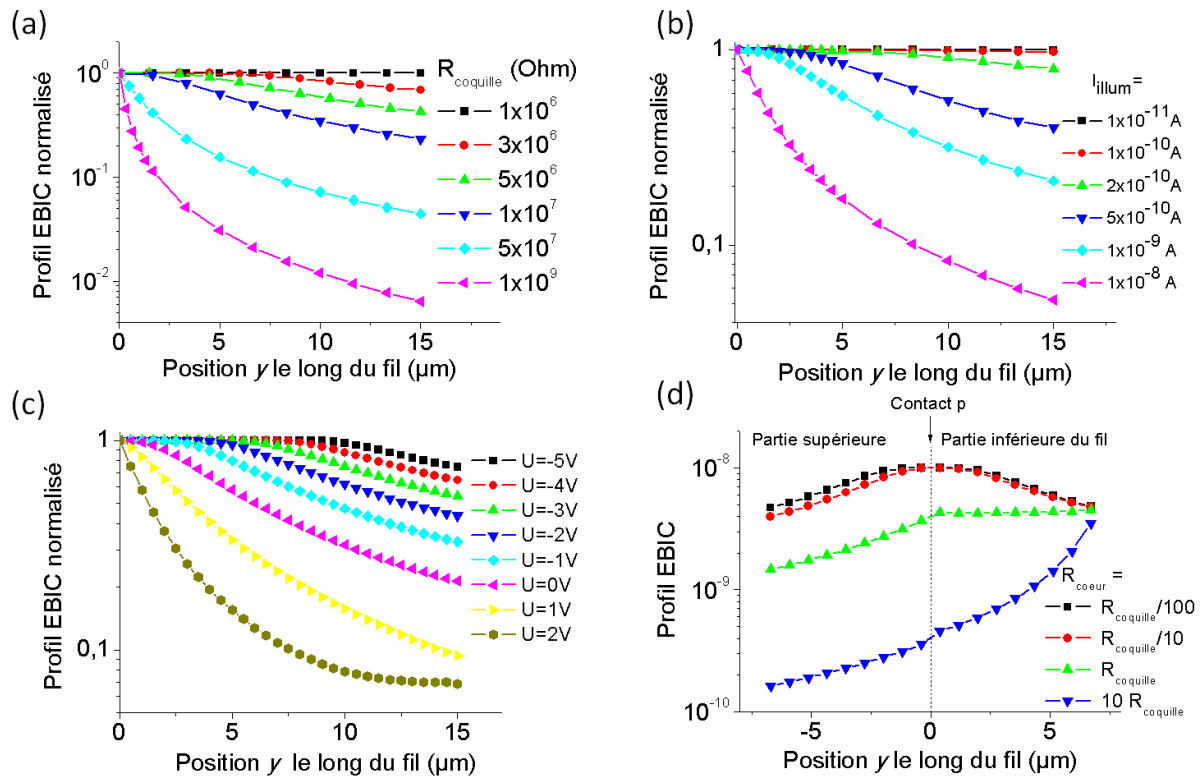


Figure 62 (a) Profils EBIC simulés pour différentes valeurs de la résistance de la coquille. (b) Profils EBIC simulés pour différentes valeurs du courant induit par les diodes (c) Profils EBIC simulés pour différentes tensions (d) Profils EBIC simulés pour différentes valeurs de la résistance de cœur.

<sup>17</sup> Pour des raisons numériques,  $R_{fuite}$  est fixé à une valeur de  $100 T\Omega$ , pour laquelle le courant total traversant les résistances de fuites est au moins  $10^5$  fois plus petit que le courant d'illumination  $I_{illum}$ .

**Tableau 9 Paramètres des simulations présentés dans la Figure 62. Les paramètres qui ne sont pas mentionnés dans le tableau correspondent à ceux extrait de la courbe I-V ajustée présentée dans la Figure 61 :  $I_{sat} = 1.2 \times 10^{-14} A$  ;  $\eta = 7.925$  ;  $R_{coquille} = 6 \times 10^6 \Omega$**

	$R_{coquille}(\Omega)$	$I_{illum}(A)$	$U(V)$	$R_{cœur}(\Omega)$	$R_{fuite}(\Omega)$
Figure 62(a)	-	$1 \times 10^{-9}$	0	0	$1 \times 10^{15}$
Figure 62(b)	$1 \times 10^7$	-	0	0	$1 \times 10^{15}$
Figure 62(c)	$1 \times 10^7$	$1 \times 10^{-9}$	-	0	$1 \times 10^{15}$
Figure 62(d)	$5 \times 10^7$	$1 \times 10^{-9}$	0	-	$1 \times 10^{15}$
Figure 64	$6 \times 10^6$ ou $3 \times 10^6$ (modulé)	0	-	$1 \times 10^5$	$1 \times 10^{15}$
Figure 65	$1 \times 10^7$	$1 \times 10^{-9}$	0	0	-
Figure 68	$1 \times 10^6$	$1 \times 10^{-10}$	0	0	$1 \times 10^{15}$ ou $1 \times 10^8$ (défaut)

Dans la Figure 62(a), on peut remarquer que pour des faibles résistances de coquille ( $R_{coquille} < 10^6 \Omega$ ), les profils EBIC calculés sont plats : quelle que soit la position de la zone excitée, tout le courant généré est collecté. Pour de plus fortes résistances de coquille, le signal EBIC décroît à mesure que l'on s'éloigne du contact. Dans un système contenant une diode excitée, le courant généré par la diode a tendance à passer le long de la coquille jusqu'au contact. Lorsque la résistance de la coquille n'est pas nulle, ce courant change le potentiel électrique de la coquille, ce qui a pour effet de polariser en direct les diodes non excitées et donc de redistribuer le courant dans la jonction. Pour un courant d'illumination donné, plus la résistance de la coquille est importante, plus la chute de potentiel par unité de longueur le long de la coquille est grande et donc plus la redistribution du courant sera forte.

On remarque dans la Figure 62(a) que la décroissance du signal EBIC n'est pas régulière mais présente un effet de seuil : le signal est constant jusqu'à une certaine distance et décroît fortement au-delà. Cette distance seuil diminue lorsque la résistance de la coquille augmente. Lorsque la résistance de la coquille dépasse  $10^7 \Omega$ , la distance seuil devient négligeable devant la longueur du fil. L'existence de ce seuil est une conséquence de la caractéristique courant-tension de type exponentiel pour les diodes. Si l'on définit la tension  $U_{d,seuil}$  aux bornes d'une diode pour laquelle le courant traversant la diode devient significatif par rapport au courant d'illumination  $I_{illum}$  dans le système, alors la dépendance exponentielle de la caractéristique de la diode fait qu'une petite variation de tension autour de cette valeur change fortement le courant traversant la diode. Donc tant que le potentiel dans la coquille reste en dessous de  $U_{d,seuil}$ , la redistribution du courant est négligeable et l'on collecte quasiment l'intégralité du courant généré<sup>18</sup>. Mais, dès que le potentiel dans la coquille atteint localement  $U_{d,seuil}$ , la redistribution devient forte et le signal EBIC chute. La valeur de la distance seuil peut être déterminée analytiquement en résolvant l'équation transcendante suivante, qui est dérivée dans l'annexe II-B.

$$y_{seuil} = \frac{\eta k_b T}{q \cdot I_{illum,tot} \cdot \rho_{coquille}} \log \left( 1 + \frac{\beta \cdot I_{illum,tot}}{J_{sat} \cdot (L - y_{seuil})} \right)$$

**Eq. 123**

<sup>18</sup> Lorsque l'on suppose que la résistance du cœur est nulle et que le cœur est connecté à la masse (potentiel nul), la tension aux bornes des diodes est égale au potentiel électrique de la coquille :  $U_d = V_{coquille} - V_{cœur} = V_{coquille} - 0 = V_{coquille}$

$I_{illum,tot}$  est le courant d'illumination total (*i.e.* la somme des courants d'illumination de chaque diode excitée),  $\rho_{coquille}$  et  $J_{sat}$  correspondent respectivement à la résistance de la coquille et au courant de saturation de la jonction par unité de longueur le long de l'axe du fil,  $L$  est la distance entre le contact et l'extrémité de l'hétérostructure et  $\beta$  est un paramètre adimensionnel qui est déterminé par la définition de « significatif » (*i.e.* si l'on considère que la redistribution du courant est significative lorsque le signal EBIC diminue de 1% (5%), on a  $\beta = 0.01$  (0.05).). Les autres paramètres ont été définis précédemment. On remarquera que la taille  $L$  du système apparaît dans l'équation et que le seuil tend vers 0 lorsque  $L$  tend vers l'infini : l'effet de seuil est donc un phénomène spécifique des micro/nanostructures (tout du moins lorsque l'on considère un système avec uniquement deux contacts électriques ponctuels).

### 3.2 Influence du courant d'illumination

La variation de la tension d'accélération  $V_{acc}$  permet de modifier le courant d'illumination  $I_{illum}$  généré par les diodes excitées, comme montré par l'équation Eq. 108. L'influence du courant d'illumination sur les profils EBIC est illustrée dans la Figure 62(b). Dans ce cas, le système simulé est identique au précédent, hormis que la résistance de la coquille est fixé à  $1 \times 10^7 \Omega$ . Le courant d'illumination varie entre  $10^{-11}$  et  $10^{-8}$  A. On constate que les profils EBIC sont plats à faible courant illumination et décroissent lorsque le courant d'illumination augmente. Cette évolution, qui présente une distance seuil, est similaire à celle décrite précédemment dans le cas où la résistance de la coquille augmente. Plus le courant d'illumination est élevé, plus la chute de potentiel le long de la coquille est importante et plus la redistribution du courant est forte. Les profils simulés peuvent être décrits par l'équation Eq. 123 qui prédit une diminution de la distance seuil lorsque  $I_{illum}$  augmente.

### 3.3 Influence de la tension appliquée

L'influence de la tension  $U$  appliquée aux bornes du nanofil a été simulée en fixant le courant d'illumination à  $10^{-9}$  A. Les résultats sont montrés dans la Figure 62(c). Ils prédisent une augmentation (diminution) de la distance seuil lorsque  $U$  décroît (croît). Etant donné que le potentiel électrique de la coquille est égal à  $U$  au niveau du contact p, lorsqu'une tension positive (négative) est appliquée, la distance nécessaire à parcourir le long de la coquille pour atteindre la tension seuil  $U_{d,seuil}$  sera plus petite (grande) qu'à  $U = 0$  V.

### 3.4 Influence d'une résistance en série avec le dispositif

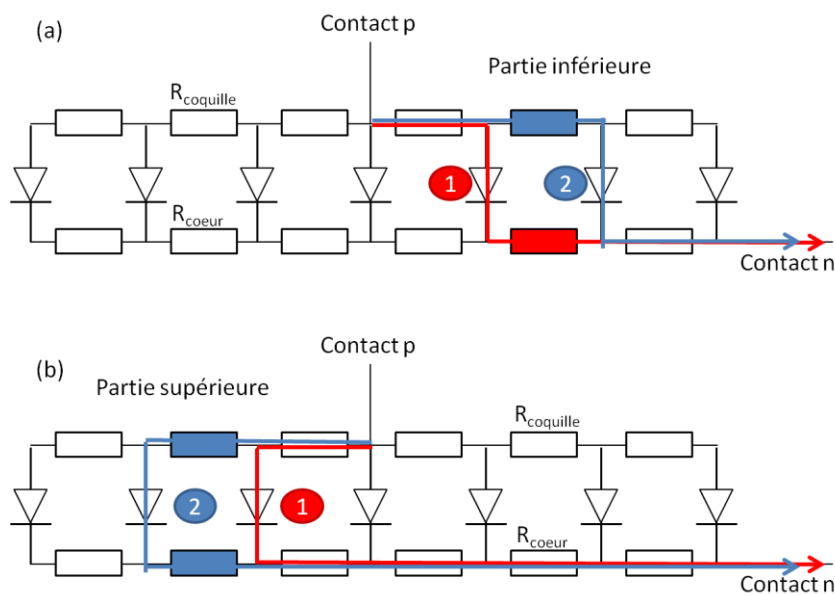
La discussion de l'influence de la tension  $U$  sur les profils EBIC est par ailleurs utile pour comprendre comment une résistance  $R_{serie}$  en série avec le dispositif et provenant par exemple des contacts, va modifier les profils EBIC. Lorsque l'on prend en compte cette résistance, la tension réellement appliquée aux bornes du nanofil n'est plus  $U$  mais  $U - R_{serie}I$  où  $I$  est le courant total, constitué du courant d'obscurité  $I_{obscurité}$  et du courant EBIC  $I_{EBIC}$ . Le courant d'obscurité réduit simplement en valeur absolue la tension effectivement appliquée d'une quantité  $R_{serie}|I_{obscurité}|$ . L'effet du courant EBIC est en revanche différent puisque son signe est imposé par la jonction p-n et non par la tension appliquée  $U$ . Par conséquent, il peut soit réduire (polarisation inverse) soit augmenter (polarisation directe) d'une quantité  $R_{serie}I_{EBIC}$  la valeur absolue de la tension effectivement appliquée. Dans les deux cas, cela réduit le signal EBIC que l'on collecte par rapport au cas idéal avec une résistance d'accès nulle. De plus, la réduction du signal est proportionnelle à  $I_{EBIC}$  ce qui fait que

les régions produisant le plus de signal seront les plus atténuées. On peut donc en conclure qu'une résistance en série tend à aplatir les profils EBIC.

### 3.5 Influence de la résistance du cœur

L'influence de la résistance de cœur est illustrée dans la Figure 62(d). Les profils EBIC ont été calculés de chaque côté du contact p, puisque la variation des profils avec  $R_{cœur}$  n'est désormais plus la même pour les parties supérieure et inférieure du fil. Les paramètres des diodes sont les mêmes que pour les précédentes simulations. La résistance de la coquille et la résistance de fuite sont égales à  $5 \cdot 10^7$  et  $10^{15} \Omega$  respectivement. On suppose que dix diodes sont excitées et le courant d'illumination pour chacune d'elles est fixé à  $10^{-9}$  A.

Comme on peut le voir sur la Figure 62(d), le fait d'introduire une résistance de cœur non nulle a un impact majeur sur les profils EBIC. La partie inférieure du fil (*i.e.* entre le contact n et le contact p) n'est désormais plus équivalente à la partie supérieure (*i.e.* entre le contact p et l'extrémité du fil). En effet, considérons deux chemins possibles reliant le contact p au contact n comme illustré dans la Figure 63 : l'un passe par une cellule élémentaire donnée, l'autre par la cellule élémentaire adjacente. Pour la partie inférieure du fil, passer d'un chemin à l'autre est équivalent à *remplacer* une résistance du cœur par une résistance de la coquille. En revanche, pour la partie supérieure du fil, cela revient à *ajouter* une résistance du cœur et une résistance de la coquille. Pour cette raison, les profils EBIC des parties supérieures et inférieures ne dépendent pas de la même manière de la résistance du cœur.



**Figure 63** Comparaison entre deux chemins possibles pour le courant entre le contact p et le contact n. (a) Pour passer du chemin 1 au 2 dans la partie inférieure du fil, il faut remplacer une résistance du cœur par une résistance de la coquille (b) Pour passer du chemin 1 au 2 dans la partie supérieure du fil, il faut ajouter une résistance du cœur et une résistance de la coquille.

Pour la partie supérieure du fil, la loi de conservation du courant implique que dans chaque cellule élémentaire le courant  $i$  traversant la résistance de la coquille est égal au courant traversant (dans la direction opposée) la résistance du cœur. En utilisant cette remarque et en appliquant la loi de Kirchhoff sur les tensions à l'intérieure d'une cellule élémentaire (par exemple à la cellule correspondant au trajet 2 dans la Figure 63(b) ), on obtient :

$$U_{d,cell\ 2} = U_{d,cell\ 1} - (R_{coeur} + R_{coquille}) \times i$$

**Eq. 124**

$U_{d,cell\ 2}$  (resp.  $U_{d,cell\ 1}$ ) est la tension aux bornes de la diodes de la cellule élémentaire correspondant au trajet 2 (resp. 1) sur la Figure 63(b). On constate à partir de l'équation Eq. 124 que  $R_{coeur}$  et  $R_{coquille}$  sont interchangeables, mais surtout que le paramètre pertinent est la somme  $R_{coeur} + R_{coquille}$  : le circuit électrique avec une résistance de cœur non nulle est donc strictement équivalent au même système avec une résistance de cœur nulle et une résistance de coquille égale à  $R_{coeur} + R_{coquille}$ . L'analyse menée précédemment pour comprendre la dépendance des profils EBIC en fonction de la résistance de coquille est donc aussi valable pour la résistance du cœur. On peut notamment en déduire que les profils EBIC vont décroître plus rapidement par rapport au même système avec une résistance de cœur nulle.

Le comportement dans la partie inférieure du fil est opposé: le signal EBIC décroît moins rapidement par rapport au système avec une résistance de cœur nulle. En effet, le courant a tendance à passer par les chemins de moindre résistance. Lorsque la résistance du cœur augmente, la différence de résistance entre les chemins reliant le contact p au contact n diminue. Le signal EBIC a donc une décroissance plus lente. Quand les résistances du cœur et de la coquille sont égales, tous les chemins sont équivalents et le profil EBIC est plat. Si la résistance du cœur augmente davantage et devient plus grande que la résistance de la coquille, le chemin de moindre résistivité consiste à éviter autant que possible de passer par le cœur : par conséquent le maximum du signal EBIC est situé à la fin de l'hétérostructure, du côté du contact n.

### **3.6 Modulation de la résistance de la coquille sous l'effet de l'excitation par le faisceau d'électrons**

Dans la section 2.3.3, l'effet d'une modulation de la résistance de la coquille sous l'effet de l'excitation par le faisceau d'électrons a été proposé pour expliquer l'apparition d'un courant induit positif lorsque la jonction est polarisée en direct. En effet, les porteurs minoritaires capturés à la surface, engendrent une modification de la courbure de bande (réduction de la zone de déplétion qui écrante la charge de surface), ce qui réduit localement la résistance de la coquille.

Le courant EBIC provenant de cet abaissement local de la résistance de la coquille a été simulé en utilisant les paramètres indiqués dans le Tableau 9. La résistance de la coquille est diminuée d'un facteur 2 dans 10 cellules élémentaires. Les calculs ont été réalisés en supposant que la résistance du cœur est égale à celle trouvée à partir de la courbe I-V ajustée ( $10^5 \Omega$ ). Les résultats sont montrés dans la Figure 64. Comme attendu, lorsque la tension  $U$  appliquée aux bornes du dispositif augmente, l'effet de la modulation de résistance s'accroît. Pour le jeu de paramètre choisis dans la simulation, le courant augmente jusqu'à 1 nA à 2 V. De plus, comme on peut le remarquer sur la Figure 64, le signal EBIC tend à se concentrer à proximité du contact (situé en  $y = 0$ ) lorsque la tension  $U$  augmente. C'est une conséquence directe de l'accroissement du courant total et de la concentration de l'injection dans la jonction p-n proche du contact quand  $U$  augmente.

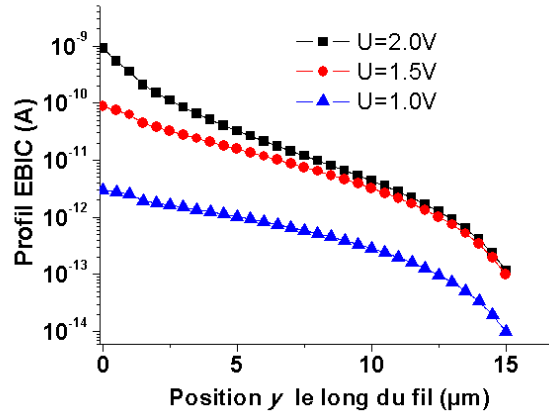


Figure 64 Profils EBIC simulés en considérant une modulation de la résistance de la coquille. Le courant d'illumination est fixé à 0.

### 3.7 Influence des fuites distribuées le long du fil

Jusqu'à présent, nous avons simulé des systèmes idéaux pour lesquels la résistance de fuite  $R_{fuite}$  était supposée infinie. Considérons maintenant la situation opposée dans laquelle le système est dominé par les fuites : dans chaque cellule élémentaire, le courant traversant la diode est alors négligeable devant le courant traversant la résistance de fuite. Par ailleurs, on suppose que les fuites sont réparties de façon homogène le long du fil (*i.e.*  $R_{fuite}$  est le même dans chaque cellule élémentaire). Le cas intermédiaire sera discuté plus loin. On suppose que la résistance du cœur est nulle. Le signal EBIC dans un tel système peut en fait être calculé analytiquement. La formule du profil EBIC, démontrée dans l'annexe II-C, est donnée par :

$$I_{EBIC}(y_0) = -I_{illum} \left[ \frac{e^{2\alpha L}}{e^{2\alpha L} + 1} e^{-\alpha y_0} + \frac{1}{e^{2\alpha L} + 1} e^{\alpha y_0} \right],$$

Eq. 125

où  $y$  représente la coordonnée spatiale le long de l'axe du fil, l'origine  $y = 0$  correspondant au contact p, et  $y_0$  est la position de la région « illuminée » (*i.e.* excitée).  $L$  est la distance entre le contact et la fin de l'hétérostructure ;  $\alpha$  est défini par  $\alpha = \sqrt{\frac{\rho_{coquille}}{\rho_{fuite}}}$  où  $\rho_{fuite}$  est la résistance de fuite par unité de longueur le long de l'axe du fil (en  $\Omega.m$ ) et  $\rho_{coquille}$  est la résistance de la coquille par unité de longueur le long de l'axe  $y$  (en  $\Omega.m^{-1}$ ). Comme on peut le remarquer, le profil EBIC est la somme d'une exponentielle décroissante et d'une exponentielle croissante. Cette dernière apparaît en raison de la dimension finie du système : son préfacteur tend vers 0 lorsque  $L$  tend vers l'infini.

Trois caractéristiques importantes, qui sont la signature de fortes fuites distribuées, peuvent être déduites de l'équation Eq. 125. Tout d'abord, le profil EBIC est indépendant de la tension appliquée  $U$ . Ensuite, le profil EBIC normalisé ne dépend pas du courant d'illumination, ce qui signifie d'un point de vue expérimental que le profil est indépendant de la tension d'accélération  $V_{acc}$ . Enfin, le profil EBIC suit une loi de type exponentiel. La longueur caractéristique de décroissance est donnée par :

$$l_{fuite\ EBIC} = \alpha^{-1} = \sqrt{\frac{\rho_{fuite}}{\rho_{coquille}}}$$

Eq. 126

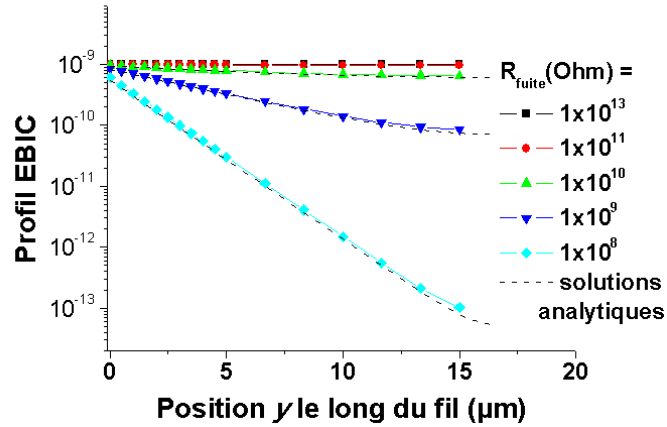


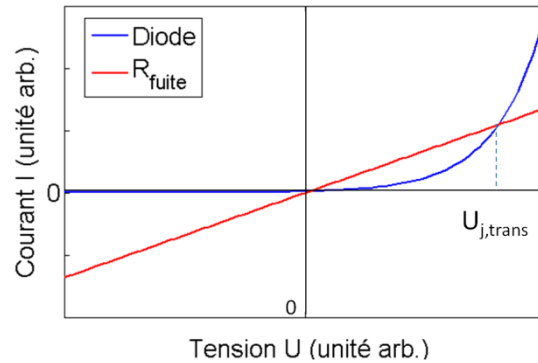
Figure 65 Profil EBIC simulés pour plusieurs valeurs de résistance de fuite. Les courbes en pointillé correspondent aux solutions analytiques calculées à partir de l'équation Eq. 126.

Les profils EBIC simulés numériquement en condition de court-circuit ( $U = 0\text{ V}$ ), pour des résistances de fuite variant entre  $10^8$  et  $10^{13}\ \Omega$  sont montrés dans la Figure 65. La résistance de la coquille et le courant d'illumination sont fixés à des valeurs de  $10^7\ \Omega$  et  $10^{-9}\text{ A}$  respectivement. Les courbes noires en pointillés correspondent aux solutions analytiques calculées à partir de l'équation Eq. 126. Les courbes simulées sont en très bon accord avec les solutions analytiques, ce qui constitue d'ailleurs une validation du code de simulation.

Considérons maintenant un cas intermédiaire pour lequel la résistance de fuite est suffisamment grande pour que le profil EBIC ne soit pas dominé par les fuites mais tout de même suffisamment faible pour que les fuites jouent un rôle significatif. La question pertinente dans ce cas est la suivante : quel est le mécanisme de transport dominant en fonction des conditions d'observation ? On peut définir un profil EBIC comme étant « dominé par les diodes » lorsque la redistribution du courant à travers les diodes est plus grande que la redistribution du courant à travers les résistances de fuite. Dans le cas opposé, on qualifiera le profil de « dominé par les fuites ». Si l'on superpose les caractéristiques Courant-Tension de la résistance de fuite et de la diode, comme schématisé dans la Figure 66, l'intersection des deux courbes donnent une valeur de la tension aux bornes de la jonction  $U_{j,trans}$  au dessus de laquelle la distribution du courant se fait de façon dominante à travers la diode. On peut remarquer que  $U_{j,trans}$  peut être positif (négatif) lorsque  $R_{fuite}$  est plus petit (plus grand) que  $\frac{\eta k_b T}{e I_{sat}}$ . Lorsque la tension aux bornes de la jonction est plus petite que  $U_{j,trans}$ , le profil EBIC sera similaire à un profil dominé par les fuites, *i.e.* il montrera une décroissance exponentielle. Inversement, lorsque la tension aux bornes de la jonction sera plus grande que  $U_{j,trans}$ , le profil EBIC sera similaire à un profil dominé par les diodes. Etant donné que la tension aux bornes de la jonction augmente avec le courant d'illumination  $I_{illum}$  ou avec la tension appliquée  $U$ , il est plus probable d'observer un profil dominé par les fuites à faible tension d'accélération et pour des tensions négatives. Deux enseignements pratiques peuvent être déduits de cette analyse :



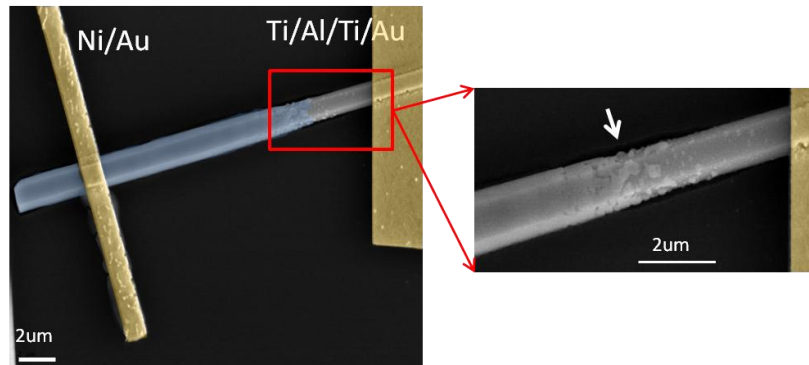
- Lorsqu'un profil est dominé par les fuites pour une tension  $U_0$  donnée et un courant d'illumination  $I_{illum0}$  fixé, le même profil devrait être observé pour des tensions  $U \leq U_0$  et des courants d'illumination  $I_{illum} \leq I_{illum0}$ .
- Un profil EBIC plat correspondrait, d'après les définitions ci-dessus, à un profil dominé par les diodes dans le cas limite où  $U_{j,trans}$  tend vers  $-\infty$ . Dans ce cas, la longueur typique de décroissance du signal EBIC  $l_{fuite\ EBIC}$  (Eq. 126) est beaucoup plus grande que la distance seuil de décroissance (Eq. 123), elle-même bien plus grande que la longueur du fil  $L$ .



**Figure 66** Superposition des caractéristiques courant-tension de la diode et de la résistance de fuite. L'intersection des deux courbes définit la tension  $U_{j,trans}$  au niveau de laquelle a lieu la transition entre le régime de distribution du courant dominé par la résistance de fuite et le régime dominé par la diode.

### 3.8 Influence d'une fuite par un défaut ponctuel

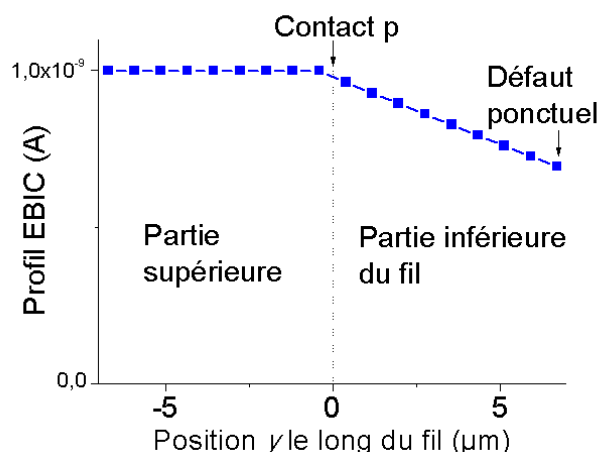
Les images MEB des fils avec une hétérostructure InGaN/GaN cœur-coquille mettent en évidence une région assez rugueuse avec des inclusions larges sur les facettes, dans la partie inférieure de la jonction p-n radiale comme illustré dans la Figure 67.



**Figure 67** Image MEB d'un nanofil de l'échantillon T1165 contacté. La fin de l'hétérostructure cœur-coquille est indiquée par la flèche blanche. Le zoom sur cette région montre que la surface est rugueuse.

Il est possible que ces régions présentent des défauts électriquement actifs, susceptibles de créer des fuites. Afin de comprendre l'influence d'une région localisée qui fuit fortement, un système contenant un défaut à la fin de l'hétérostructure a été simulé. Le système contient 100 cellules élémentaires et les profils sont calculés de chaque côté du contact p. Les paramètres des diodes sont les mêmes que ceux des précédentes simulations (voir Tableau 9, page 126). Les résistances du cœur et de la coquille sont fixées respectivement à 0 et  $10^6 \Omega$ . Dix diodes sont excitées, chacune produisant un courant d'illumination de  $10^{-10}$  A. La résistance de fuite est fixée à  $10^{15} \Omega$  pour toutes les

résistances exceptée celle située à l'extrémité de l'hétérostructure dont la valeur est choisie égale à  $10^8 \Omega$  afin de simuler le défaut. La tension appliquée  $U$  est de 0 V. Avec ces paramètres, si l'on n'avait introduit le défaut local, le profil EBIC serait parfaitement plat à 0 V, *i.e.* la redistribution du courant est négligeable. Cependant, comme on peut le remarquer sur la Figure 68, quand le défaut est pris en compte, le profil EBIC n'est constant que sur la partie supérieure du fil et décroît linéairement dans la partie inférieure.



**Figure 68** Profil EBIC simulé en présence d'un défaut ponctuel qui fuit localisé à l'extrémité de l'hétérostructure, dans la partie inférieure du fil.

L'origine de la décroissance linéaire est démontrée dans l'annexe II-D. La démonstration repose sur le fait que le potentiel électrique varie linéairement de part et d'autre de la zone excitée puisque la redistribution du courant est négligeable (exceptée à travers le défaut). On montre alors que le profil EBIC est décrit par la formule suivante :

$$I_{EBIC - \text{défaut ponctuel}}(y_0) = -I_{illum} \left( 1 - \frac{\rho_{coquille}}{R_{défaut} + \rho_{coquille} L_{c-b}} y_0 \right),$$

**Eq. 127**

où  $R_{défaut}$  est la résistance de fuite du défaut,  $y_0$  est la position de la région excitée et  $L_{c-b}$  est la distance entre le contact p et la fin de l'hétérostructure. Les définitions des autres paramètres sont identiques à celles données précédemment.

Cette équation met en évidence quelques propriétés importantes des profils EBIC en présence d'une fuite localisée. Tout d'abord, dans le régime où la redistribution par les fuites est dominante (*i.e.*  $U_j < U_{j,trans}$ ), le profil EBIC ne dépend pas de la tension appliquée et montre toujours une décroissance linéaire dans la partie inférieure du fil. Deuxièmement, le défaut localisé n'a aucun effet sur le profil EBIC de la partie supérieure du fil. D'un point de vue électrique, cela se comprend aisément : si l'on considère les deux chemins reliant les contacts p et n, l'un passant par la région illuminé et l'autre par le défaut, ils n'ont aucune portion de circuit en commun et sont donc indépendants l'un de l'autre. Lorsque l'on suppose que la résistance du cœur n'est plus nulle, la démonstration de l'équation Eq. 127 reste valable et le profil est inchangé. En effet, dans ce cas, les chemins de redistribution de courant générés, l'un rejoignant le contact p par la coquille l'autre le contact n en passant par la coquille puis par le défaut, ne passent pas par le cœur et donc sont

indépendant de la résistivité du cœur (du moins en considérant comme métallique le cœur très fortement dopée en  $n^{++}$ -GaN situé entre la fin de l'hétérostructure et le contact n). Une explication plus détaillée de ce phénomène est présentée dans l'annexe II-D.

## 4 Comparaison entre les résultats théoriques et expérimentaux

L'étude systématique réalisée dans la section précédente offre désormais des outils pour analyser plus en détails les résultats expérimentaux présentés dans la section 2.3 et en particulier pour comprendre les écarts par rapport au cas idéal d'une structure cœur-coquille homogène.

Les profils EBIC à 0 V ont été simulés en utilisant les paramètres obtenus en ajustant la courbe I-V expérimentale (cf. Figure 61 page 123). La valeur du courant d'illumination a été ajustée de façon à ce que le courant au niveau du contact p soit égal à celui mesuré expérimentalement. La comparaison entre les profils expérimentaux et simulés est montrée dans la Figure 69. On peut remarquer que, malgré sa simplicité, le modèle explique la plupart des tendances expérimentales observées : (i) à  $V_{acc} = 3 \text{ kV}$ , un signal quasiment constant est observé sur la partie supérieure du fil et sur les 2  $\mu\text{m}$  près du contact dans la partie inférieure. Cela indique que la redistribution du courant dans la jonction lorsque l'on excite ces régions est négligeable. (ii) Lorsque la tension d'accélération augmente, le modèle prédit une transition d'un profil constant vers un profil qui décroît de part et d'autre du contact p. Le modèle prédit que la pente du profil augmente lorsque  $V_{acc}$  augmente, ce qui est effectivement observé. (iii) Un bon accord entre le profil mesurés et simulés est observé dans la partie inférieure du fil, excepté dans la région proche du pied du fil qui présente un signal plus faible que celui prédit. Malgré cela, la pente du profil dans cette région est bien reproduite par la simulation. En ce qui concerne la partie supérieure du fil, la simulation prédit que le signal décroît, en accord avec les observations. Cependant, les profils expérimentaux ont systématiquement une pente plus faible que ceux simulés.

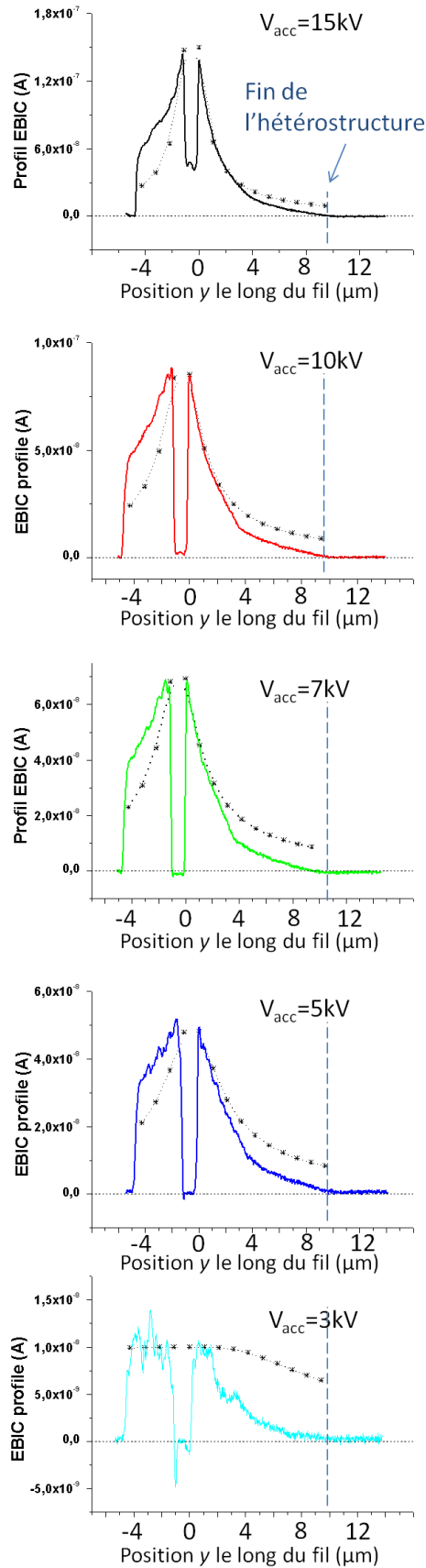
Pour comprendre cet écart, il faut remarquer que le modèle décrit un système idéal homogène dans lequel toutes les cellules élémentaires ont les mêmes paramètres. Cependant, dans les dispositifs réels, les paramètres électriques peuvent varier le long du fil, par exemple, en raison de variations d'épaisseur ou des gradients de composition. Ainsi, la comparaison entre les profils expérimentaux et les profils idéaux peut fournir des informations précieuses concernant les inhomogénéités du fil. L'objectif de ce paragraphe sera donc d'illustrer quel type d'information on peut déduire de ces comparaisons. Les écarts entre le signal EBIC mesuré et celui simulé peut provenir de modifications concernant soit l'efficacité de transport  $\Gamma$  soit l'efficacité de collecte de la jonction  $\Sigma$ . Ils faut donc envisager plusieurs hypothèses pour expliquer les différences entre les profils mesurés et simulés.

Comme cela a été mentionné précédemment, les profils simulés surestiment de façon systématique le courant collecté dans la partie inférieure du fil. Pour des tensions d'accélération supérieures à 3 kV, les simulations ont au contraire tendance à sous-estimer le signal EBIC. Trois hypothèses peuvent être considérées pour expliquer cet écart : (1) des fuites, (2) un gradient de résistance dans la coquille et (3) une variation du courant d'illumination, *i.e.* de l'efficacité de collecte le long du fil. Discutons chacune de ces hypothèses :

- 1) Les fuites pourraient potentiellement expliquer la chute du signal EBIC dans la partie inférieure du fil. En effet, lorsque l'on regarde le profil EBIC mesuré à 3 kV en échelle

logarithmique (Figure 59 (c)), une décroissance avec une tendance exponentielle est observée dans la partie inférieure du fil. D'après les résultats de la section 3, cela pourrait être la signature d'un profil dominé par les fuites. Cependant, deux arguments réfutent cette hypothèse. D'une part, c'est en contradiction avec les observations expérimentales qui indiquent une augmentation de l'efficacité de transport (correspondant à un élargissement de la zone produisant un signal EBIC mesurable dans la Figure 59) pour des polarisations inverses ( $U < 0$  V). En effet, on a vu précédemment que lorsqu'un profil EBIC est dominé par les fuites pour une tension  $U_0$  donnée, les profils EBIC pour les tensions  $U \leq U_0$  sont alors également dominés par les fuites et sont indépendants de la tension  $U$ . D'autre part, comme on peut le voir sur la Figure 58, le profil EBIC à 0 V est constant à proximité du contact p entre les positions  $0 \leq y \leq 2 \mu m$ . Si la partie inférieure du fil présentait même localement des fuites significatives, le profil ne pourrait pas être constant, comme cela a été discuté dans la section 3.8. Par conséquent, on peut en conclure que les fuites dans le fil sont négligeables lorsque l'on considère des tensions appliquées proches de 0 V.

- 2) La deuxième hypothèse pour expliquer la déviation entre les profils expérimentaux et les profils prédits par le modèle est que la résistivité de la coquille décroît entre le pied et le sommet du fil. Le gradient de résistivité pourrait provenir de plusieurs phénomènes : il peut être causé par un gradient de concentration des dopants (Mg), un gradient de l'épaisseur de la coquille ou un gradient de la mobilité des trous en raison d'une densité de défauts plus importante à la base du fil. Cette hypothèse pourrait expliquer les différences observées de chaque côté du contact p à 0 V.
- 3) La troisième hypothèse qui pourrait expliquer le désaccord entre les profils expérimentaux et simulés est que l'efficacité de collecte et donc le courant localement induit par la jonction p-n pourrait augmenter entre la base de l'hétérostructure et le sommet du fil. Cela pourrait être par exemple le cas si le temps de vie des porteurs minoritaires et leur longueur de diffusion variaient le long du fil, à cause par exemple d'un taux de capture des puits dépendant de la position (e.g. à cause d'une variation de la composition en Indium) ou de la qualité cristalline variable le long du fil.



**Figure 69** Comparaison entre les profils EBIC expérimentaux (courbe en trait plein) et les profils simulés (pointillé) pour une tension appliquée nulle et à différentes tensions d'accélération.

Les hypothèses (2) et (3) sont interdépendantes : s'il y a un gradient de dopage le long de la coquille, cela conduit à l'apparition d'un gradient du champ électrique interne de la jonction et donc un gradient du taux de capture et du taux d'extraction des puits quantiques. La combinaison de ces deux effets (*i.e.* la réduction de la résistivité de la coquille et l'accroissement du courant d'illumination) pourraient expliquer la déviation entre les profils expérimentaux et les profils idéaux prédits par le modèle.

Lorsque le dispositif est polarisé en inverse, si les fuites sont négligeables, le modèle prédit un accroissement de l'efficacité de transport qui doit naturellement conduire le signal EBIC à devenir constant le long du fil (cf. Figure 62(c)). Expérimentalement, un accroissement de l'efficacité de transport, se manifestant par un élargissement de la région produisant un signal EBIC est en effet observé (Figure 58 et Figure 59). Cependant, contrairement à la prédiction du modèle, l'enveloppe du profil EBIC à 3 kV ne devient pas constante, mais présente plutôt une décroissance linéaire du sommet jusqu'à la fin de l'hétérostructure. Cette observation est en faveur de l'hypothèse (3) mentionnée ci-dessus : lorsque l'efficacité de transport tend vers 1 pour des tensions  $U$  négatives, on s'attend à ce que la variation spatiale du signal EBIC provienne principalement des variations locales de l'efficacité de collecte de la jonction (*i.e.* des variations locales du courant généré). Cependant, étant donné que l'efficacité de transport dépend aussi de la résistance de la coquille,  $\Gamma$  pourrait ne jamais atteindre 1 : la résistance de la coquille augmente lorsque  $U$  diminue en raison de l'élargissement de la ZCE de la jonction p-n.

Enfin, une fuite ponctuelle à l'extrémité du nanofil aurait pu expliquer le profil quasi-linéaire observé à 3 kV pour des tensions  $U$  négatives. Les fuites peuvent en effet impliquer des phénomènes non linéaires faisant que, bien qu'elles soient négligeables à 0 V, les fuites deviennent significatives lorsque  $U$  diminue. Cependant, cette hypothèse est en contradiction avec l'observation selon laquelle le signal n'est pas constant sur la partie supérieure du fil et peut donc être réfutée.

A 15 kV, les profils EBIC pour des tensions appliquées négatives montrés dans la Figure 59 ne sont pas linéaires dans la partie inférieure du fil. Le changement de la forme du profil entre 3 et 15 kV provient de l'accroissement du courant d'illumination, qui conduit à une redistribution du courant dans les diodes non-excitées.

En ce qui concerne les profils EBIC mesurés pour des tensions positives, le modèle prédit une chute du signal en accord avec les résultats expérimentaux. Comme discuté précédemment, l'apparition d'un signal positif est attribuée à la réduction de la résistance de coquille sous l'effet de l'excitation par le faisceau d'électron. Les simulations de ce phénomène reproduisent assez bien les profils observés avec une concentration du signal à proximité du contact lorsque la tension appliquée augmente.

Pour résumer, les observations expérimentales suggèrent la présence d'un gradient d'efficacité de collecte qui est meilleure sur le sommet du fil que sur le pied. Ce gradient est probablement associé à une réduction de la résistivité de la coquille au sommet du fil. L'hypothèse de fuite importante sur la partie inférieure de l'hétérostructure est en contradiction avec les profils EBIC mesurés pour des tensions  $U \leq 0$  V.

## 5 Conclusion

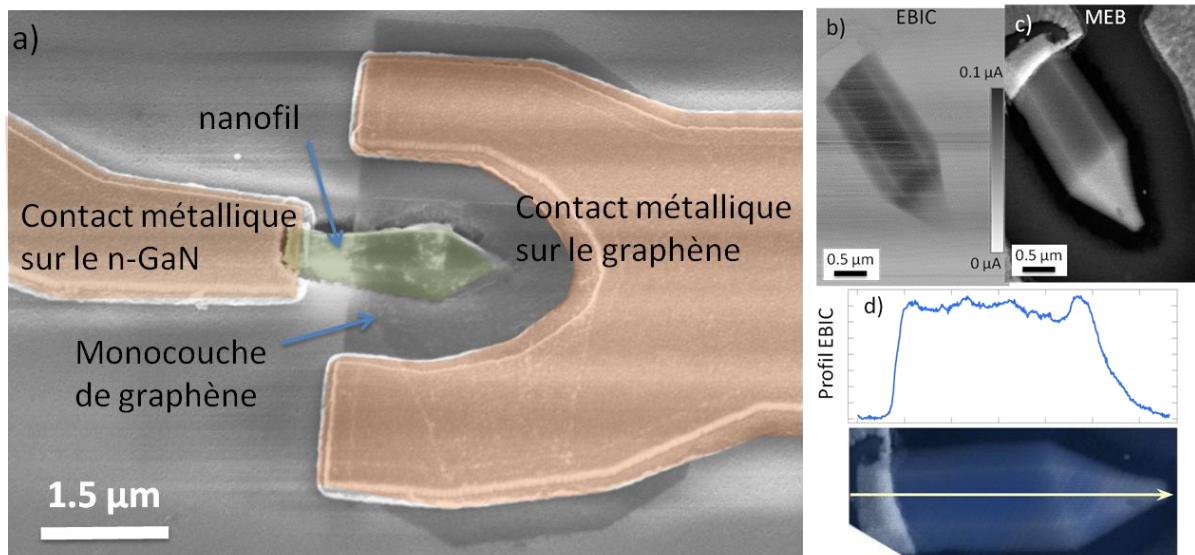
Au cours de ce chapitre, nous avons montrés que les cartographies EBIC réalisées sur des nanofils cœur-coquille dépendent à la fois des variations spatiales de l'efficacité de collecte des porteurs de charges *minoritaires* et de l'efficacité de transport des porteurs de charge *majoritaires* le long du cœur et de la coquille jusqu'aux contacts. Dans la section 2.3, les mesures expérimentales ont mis en évidence un effet de seuil dans les profils EBIC : le profil est plat à proximité du contact p (*i.e.* l'efficacité de transport est proche de 1) et il décroît rapidement au-delà d'une distance seuil. Cette distance seuil décroît lorsque la tension d'accélération augmente. Cette observation a été expliquée par l'effet combiné de la résistance de coquille et de la relation fortement non linéaire entre le courant traversant la jonction et la tension à ses bornes. Elle a été confirmée par les simulations présentées dans la section 3. L'algorithme de la simulation est expliqué dans l'annexe II-A. Une approche théorique, détaillée dans l'annexe II-B, permet de plus de calculer analytiquement la distance seuil en fonction des paramètres du fil. Il en ressort notamment que le phénomène de seuil est spécifique aux nanofils : il ne peut être que difficilement observé dans les systèmes de grande taille tel que les dispositifs en couches minces. On montre également dans cette annexe que la redistribution du courant EBIC le long de la jonction induite par la résistance de la coquille suit un comportement quelque peu contre-intuitif : lorsque l'efficacité de transport est proche de 1 (*i.e.* sous le seuil), la redistribution du courant ne se fait pas le long du trajet principal emprunté par le courant EBIC (*i.e.* entre la zone excitée et le contact p) mais a lieu au contraire dans la région où le courant parcourant la coquille est le plus faible (*i.e.* entre la zone excitée et l'extrémité du fil). Dans ce chapitre, l'efficacité de collecte de la jonction a par ailleurs été estimée à partir des données expérimentales. On constate qu'elle ne dépend pas de façon monotone de la tension d'accélération du faisceau. Ce comportement a été expliqué à l'aide d'un modèle simple, qui calcule l'efficacité de collecte de la jonction à partir du recouvrement entre la zone de génération supposée sphérique et la zone de collecte des porteurs de charges dont les dimensions (profondeur et épaisseur) sont considérées comme des paramètres d'ajustement. La meilleure courbe ajustée a été obtenue lorsque l'on suppose que la zone de collecte n'est constituée que de la zone de charge d'espace (ZCE) de la jonction, les dimensions de cette dernière ayant été obtenues auparavant par simulation à l'aide du logiciel Nextnano à partir de données sur le dopage du cœur et de la coquille. Ce résultat semble également confirmé par le bon accord entre les profils EBIC mesurés perpendiculairement à l'axe du fil et les profils simulés. Avec des considérations basiques, on aurait pu s'attendre à ce que la zone de collecte contienne la ZCE élargie de part et d'autre par la longueur de diffusion des porteurs minoritaires : cela pourrait donc laisser penser que les longueurs de diffusion sont dans notre cas très faibles. Cependant, deux effets susceptibles de limiter fortement la collecte doivent être pris en compte : les puits quantiques peuvent capturer les trous générés dans le cœur avant qu'ils ne traversent la jonction et la surface du fil peut induire une forte recombinaison des électrons générés dans la coquille. L'effet de la surface sur l'efficacité de collecte de la jonction est calculé dans l'annexe II-F. On y montre notamment que lorsque la surface est trop proche de la ZCE l'élargissement de la zone de collecte au-delà de la ZCE ne dépend plus de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires.

La comparaison entre les profils expérimentaux et simulés montre que la simulation reproduit qualitativement les tendances observées. L'écart entre les deux peut donner des informations sur les inhomogénéités des propriétés électriques le long de l'axe du fil. La discussion menée dans la section 4 aboutit aux résultats suivants : dans le fil étudié, il existe probablement un gradient

d'efficacité de collecte et de résistivité de la coquille le long de l'axe du fil. La meilleure efficacité de collecte et la plus faible résistivité de la coquille est obtenue au sommet du fil. Il semblerait que les fuites dans cette structure soient faibles. Pour confirmer ces résultats, des mesures complémentaires réalisées sur une structure possédant deux contacts sur la coquille seraient nécessaires : cela permettrait de déterminer expérimentalement les profils de résistivité du cœur et de la coquille ainsi que le profil d'efficacité de collecte de la jonction le long de l'axe du fil. Plus de détails sur ce point sont fournis dans l'annexe II-E. La méthode expérimentale proposée dans l'annexe II-E pour mesurer les profils de résistivité du cœur et de la coquille découle de l'analyse théorique des profils EBIC en présence d'un défaut ponctuel présentée dans l'annexe II-D.

L'annexe II-C donne par ailleurs la démonstration de l'expression analytique des profils EBIC en présence de fuites distribuées de façon homogène le long du fil. On y montre notamment que la façon dont le courant se redistribue le long du fil est très différente du cas « sans fuite » traité dans l'annexe II-B : dans ce cas, l'image intuitive du courant qui se redistribue localement dans la jonction à mesure qu'il s'écoule le long de la coquille vers le contact est valable.

Comme nous l'avons vu au cours de chapitre, les mesures EBIC réalisées sur des structures cœur-coquille avec un unique contact ponctuel sur la coquille sont complexes à analyser et ne permettent pas à elles seules de sonder toutes les propriétés électriques de ces dispositifs. D'autres approches complémentaires sont nécessaires pour comprendre en détails ces structures. Parmi ces approches, des variantes de l'EBIC sont possibles. La variante, discutée dans l'annexe II-E, qui consiste à utiliser un système à au moins deux contacts sur la coquille semble notamment prometteuse de part la richesse des informations qu'elle procure. En guise de perspective, deux autres variantes développées dans l'équipe par Vladimir Neplock et Maria Tchernycheva sont présentées succinctement ci-dessous.



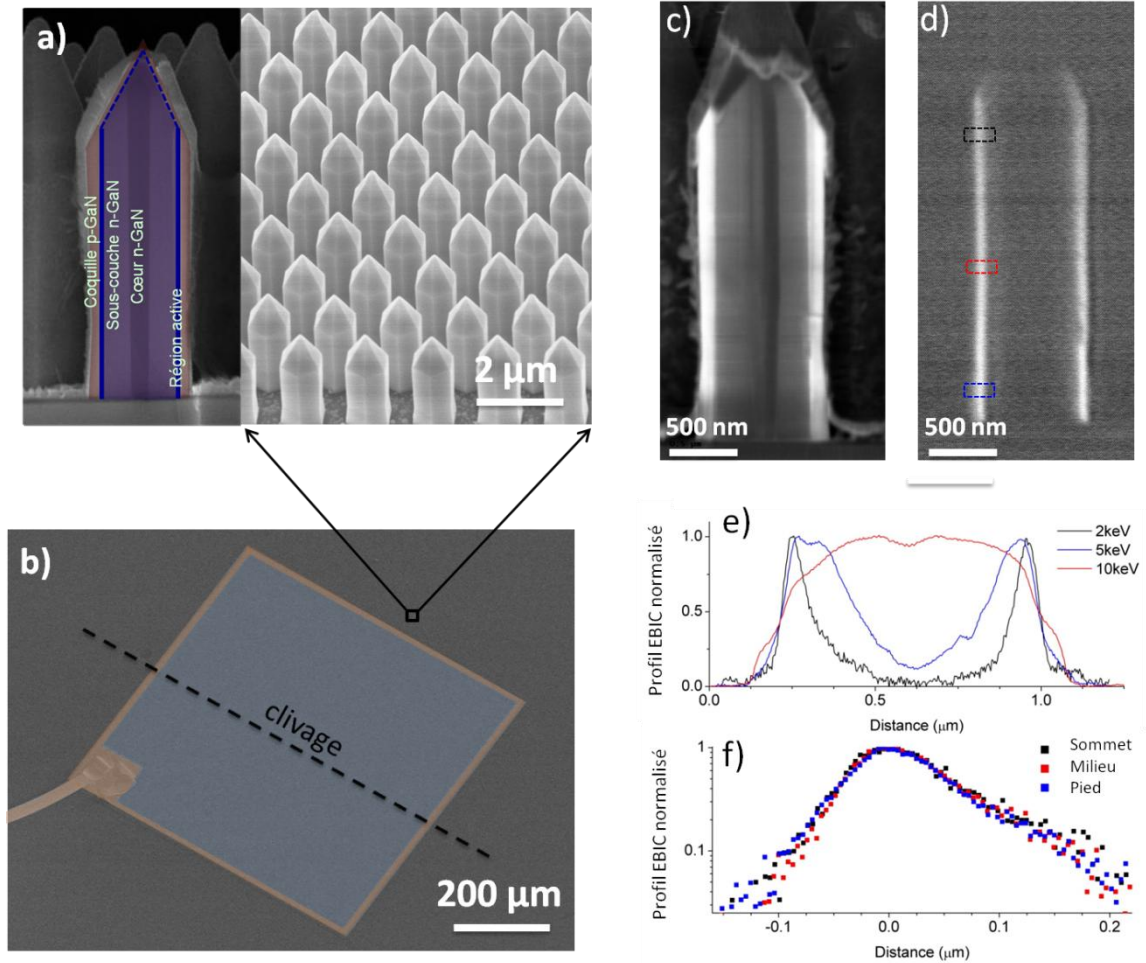
**Figure 70** a) Nanofil cœur-coquille contacté par une monocouche de graphène observé en MEB avec une inclinaison de 45°. b) Cartographie EBIC du nanofil. c) Image MEB correspondant à la cartographie EBIC. d) Profil EBIC mesuré le long du nanofil.



La première variante, complémentaire de l'EBIC à un contact ponctuel, consiste à utiliser un contact en graphène recouvrant la majeure partie de la coquille. Le graphène, matériau conducteur constitué d'une monocouche atomique de carbone, a l'avantage d'être transparent au faisceau d'électron, ce qui n'est pas le cas des contacts métalliques classiques. Une image MEB d'un tel dispositif est présentée dans la Figure 70(a). On notera que la coquille p recouvre l'ensemble du nanofil, contrairement aux fils étudiés dans ce chapitre. Le graphène est lui-même contacté avec une électrode métallique ne recouvrant pas le fil. Avec cette approche, le transport de charge des porteurs majoritaires dans la coquille a lieu perpendiculairement à l'axe du fil et non pas le long de l'axe, comme c'est le cas dans la structure à un contact ponctuel. Cela supprime donc la cause principale de la diminution de l'efficacité de transport, la résistance de cœur étant généralement suffisamment faible pour n'avoir qu'un impact négligeable sur l'efficacité de transport. Ainsi, le signal EBIC collecté dans cette géométrie correspond uniquement à l'efficacité de collecte de la jonction. La Figure 70(b) montre par exemple une cartographie EBIC obtenue avec ce type de dispositif. On remarque que le signal est homogène le long de la coquille, comme le confirme le profil EBIC montré dans la Figure 70(d).

La seconde variante consiste à cliver les nanofils le long de leur axe et à les observer par la tranche. Elle permet de visualiser directement la ZCE de la jonction, et non pas de façon indirecte comme c'est le cas avec la méthode à un contact par le truchement des profils EBIC latéraux. Cette approche est particulièrement adaptée pour les échantillons possédant une forte densité de nanofils et qui peuvent être contactés en ensemble directement sur leur substrat d'épitaxie : de cette façon, il est probable de parvenir à cliver au moins un nanofil lorsque l'on clive le dispositif. C'est le cas notamment pour les nanofils obtenus par croissance sélective (Selective Area Growth). Un exemple d'un tel dispositif est montré dans la Figure 71(a). L'image de droite de la Figure 71(a), obtenue en MEB, montre une vue inclinée d'un échantillon après croissance. On observe les nanofils disposés de façon régulière sur le substrat de croissance. L'image de gauche montre la tranche d'un fil clivé et met en évidence la structure cœur-coquille de type LED, *i.e.* une hétérostructure de type jonction p-n avec une région active constituée d'une série de puits quantiques. La Figure 71(b) montre un mesa de nanofils contactés par une couche conductrice d'oxyde d'indium et d'étain (*Indium Tin Oxide* ou ITO) de quelques centaines de nanomètres d'épaisseur. L'ITO recouvre l'ensemble de la coquille dopée p des nanofils. Le cœur des nanofils, constitué de GaN dopé *n*, est en relation d'épitaxie avec le substrat, qui est lui-même dopé et sur lequel est déporté le contact n. Le mesa, qui contacte en parallèle plusieurs centaines de milliers de nanofils, a été clivé au niveau de la ligne en pointillée pour l'observation en EBIC. Un exemple de cartographie EBIC obtenue pour une tension d'accélération de 2 kV sur un fil clivé est montré dans la Figure 71(d). L'image MEB correspondante est présentée dans la Figure 71(c). On observe de façon très nette la ZCE de la jonction p-n. Les profils EBIC mesurés à différentes tensions d'accélération sont tracés dans la Figure 71(e). La forte dépendance des profils avec la tension d'accélération s'interprète de la même façon que dans la section 2.3.1 : cela provient de la variation du recouvrement entre la sphère de génération et la zone de collecte de la jonction. Le point intéressant est qu'à faible tension d'accélération, lorsque le volume de génération a des dimensions caractéristiques faibles devant le diamètre du fil, la géométrie 3D du fil peut être négligée et on se retrouve dans un cas analogue à celui d'un système en couche mince. Dans ces conditions, les profils EBIC tracés en échelle logarithmique dans la Figure 71(f) mettent en évidence une dépendance exponentielle du courant EBIC en fonction de la distance entre la zone excitée et le bord de la ZCE. Cela semble indiquer d'une part que malgré la faible valeur de la tension

d'accélération, on est en régime de faible injection<sup>19</sup>. D'autre part, cela peut être utilisé pour extraire la longueur de diffusion des trous dans le cœur dopé n : on obtient ainsi  $70 \pm 10$  nm. La même analyse pour les électrons dans la coquille p conduirait à une longueur de diffusion de  $25 \pm 5$  nm. Mais, cette valeur doit être considérée avec les précautions qui s'imposent en raison de la proximité de la surface: comme cela est montré dans la deuxième section de l'annexe II-F, la longueur caractéristique de décroissance du signal EBIC  $L_{eq}$  dépend dans ce cas à la fois de la longueur de diffusion des porteur minoritaire  $L$  et de la distance  $d_{ZCE}$  entre la surface et le bord de la ZCE de la jonction. Elle est donnée par  $\frac{1}{L_{eq}} = \frac{1}{d_{ZCE}} + \frac{1}{2L}$ .



**Figure 71** (a) A gauche : image MEB d'un nanofil clivé mettant en évidence sa structure cœur-coquille de type jonction p-n. A droite : vue inclinée des nanofils sur leur substrat après croissance. (b) Image MEB en vue inclinée d'un dispositif à ensemble de nanofil contacté à l'aide d'un fil d'or par microsoudure. Le mesa est couvert de façon conforme d'ITO. (c) et (d) : image MEB et cartographie EBIC correspondante. (e) Profil EBIC mesuré perpendiculairement à l'axe du fil pour différente tension d'accélération. (f) Profil EBIC mesuré à 3 kV au niveau de la jonction. La partie négative de l'axe des abscisses correspond à la coquille dopée p.

<sup>19</sup> Il faut noter que dans les nanofils présentés ici le dopage du cœur et de la coquille est significativement plus élevé que dans les fils étudiés au cours de ce chapitre. Les conditions pour être en régime de faible injection sont donc atteintes pour des tensions d'accélération plus faible.

# Annexe II-A

## - Algorithme de la modélisation du transport des porteurs majoritaires dans une structure cœur-coquille de type jonction p-n -

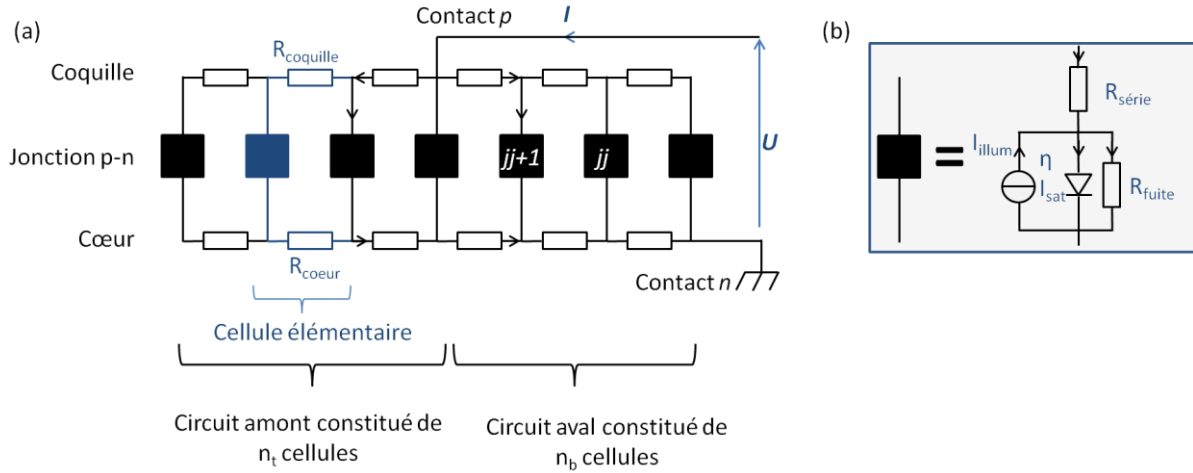
---

Cette annexe présente l'algorithme utilisé dans les simulations du transport des porteurs majoritaires au sein du fil à hétérostructure radiale de type jonction p-n. En toute rigueur, la structure cœur-coquille étant intrinsèquement tri-dimensionnelle, un modèle 3D devrait être utilisée pour décrire de façon précise la manière dont le courant s'écoule au sein de cette structure. Cependant, pour des questions de simplicité et de rapidité de calcul, une approche plus basique a été développée. Cette approche exploite les symétries du système : ce dernier possède en effet, en première approximation, une symétrie de rotation autour de l'axe du fil : pour le fil, il s'agit plus précisément d'une symétrie d'ordre 6 (géométrie hexagonale) que l'on approxime à une symétrie d'ordre infini (cylindre). De plus, on suppose également que les contacts et l'excitation par le faisceau d'électron possèdent cette symétrie de rotation : on ne prend donc pas en compte le fait que le contact sur la coquille ne soit présent que sur 3 des 6 facettes et que l'excitation en EBIC se fasse dans une direction radiale préférentielle.

Grâce à la symétrie de rotation, les grandeurs physiques ne dépendent pas de la coordonnée  $\theta$  dans la base cylindrique dont l'axe de référence correspond à l'axe du fil, ce qui permet d'utiliser un modèle bidimensionnel dans lequel on ne se préoccupe que du transport le long de l'axe du fil et dans la direction radiale. Ce modèle est schématisé dans la Figure 72. Le fil est discrétisé en petite portion le long de son axe et chaque portion est modélisé par un circuit électrique élémentaire constitué de deux résistances  $R_{coquille}$  et  $R_{cœur}$  connectées à la jonction p-n représentée par les carrés noirs dans la Figure 72(a). Les résistances rendent compte du transport le long de l'axe du fil dans le cœur et la coquille alors que les carrés noirs modélisent le transport radial à travers la jonction p-n. Comme cela est indiqué dans la Figure 72(b), la jonction p-n est elle-même modélisée par plusieurs éléments, présents ou non en fonction du dispositif que l'on souhaite étudier et des conditions que l'on souhaite modéliser. L'élément principal de la jonction est la diode caractérisée par son courant de saturation  $I_{sat}$  et son paramètre d'idéalité  $\eta$ . Lorsque la jonction p-n est excitée optiquement ou par un faisceau d'électrons par exemple, elle génère un courant qui est représenté dans le modèle par une source de courant placée en parallèle de la diode et délivrant un courant  $I_{illum}$  orienté du cœur vers la coquille. Généralement, la modélisation de la jonction p-n par une diode est idéale : en pratique, des défauts créant des états localisés, au milieu du gap, ou des dislocations par exemple peuvent induire des courants de fuite. La modélisation la plus simple de ces modes de conceptions parasites consiste à introduire une résistance de fuite  $R_{fuite}$  en parallèle de la diode. Enfin, il est parfois intéressant d'introduire une résistance  $R_{série}$  en série avec la diode qui peut par exemple rendre compte de la résistance de la coquille lorsque l'on se place dans une configuration où le transport dans la coquille se fait selon une direction radiale (lorsque le contact recouvre l'intégralité de la coquille par exemple).

L'ajout du contact  $p$  sur la coquille rend le système asymétrique. On distingue alors le circuit dit « amont », constitué de  $n_t$  cellules élémentaires et qui représente la partie du fil situé entre le sommet et le contact  $p$ , et du circuit dit « aval » qui modélise le transport dans la partie située entre

le contact  $p$  et le contact  $n$  et qui est constitué de  $n_b$  cellules<sup>20</sup>. La cellule n°  $n_t$  du circuit amont correspond à la cellule au sommet du fil et la cellule n°  $n_b$  du circuit aval, correspond à la cellule au niveau du contact  $p$  (n° des cellules décroissant de la gauche vers la droite dans le schéma de la Figure 72).



**Figure 72 (a) Schéma du modèle électrique utilisé pour simuler les propriétés de transport des porteurs majoritaires dans les structures cœur – coquille. Les carrés noirs représentent la jonction p-n dont le modèle est décrit dans la figure (b). Les flèches indiquent le signe positif choisi par convention pour les courants. L'orientation des tensions est choisie de telle sorte à être en convention récepteur. Dans l'algorithme, les cellules sont indexées de façon croissante de la droite vers la gauche, comme indiqué par les mentions «  $jj$  » et «  $jj+1$  ». (b) Circuit équivalent modélisant la jonction p-n.**

Lorsque l'on a un système fixé, c'est-à-dire que l'on connaît la valeur de chaque paramètre ( $R_{coquille}$ ,  $R_{cœur}$ ,  $I_{sat}$ ,  $\eta$ , etc.) dans chaque cellule élémentaire, les questions auxquelles on veut répondre sont généralement les suivantes :

- Pour une tension appliquée  $U$  donnée, quel courant traverse la structure ? Quelle est la caractéristique I-V du dispositif ?
- Pour un courant injecté donné (ou une tension appliquée  $U$  donnée), comment le courant se répartit-il dans la jonction, le long du fil ?
- Quel est le profil EBIC de cette structure ?

Pour y répondre, il est nécessaire de connaître les courants (tensions) traversant (aux bornes de) chacun des éléments du circuit. La résolution du système ne peut pas se faire de façon directe, *i.e.* on ne peut pas choisir par exemple une tension  $U$  appliquée aux bornes du système et calculer pas-à-pas les courants et tensions pour chaque éléments du circuit d'une seule traite : il est nécessaire de procéder par « tâtonnement » pour converger progressivement vers la condition que l'on souhaite (« la tension aux bornes du dispositif vaut 2 V » par exemple). Le schéma de l'algorithme utilisé pour la résolution est montré dans la Figure 73. La variable de « tâtonnement » utilisée dans la simulation est la tension  $U_{d,t}(n_t)$  aux bornes de la diode  $n_t$  du circuit amont située au sommet du fil (la plus à gauche sur le schéma de la Figure 72). L'indice  $t$  rappelle qu'il s'agit de la grandeur  $U_d$  pour le circuit amont (top). L'indice  $b$  (bottom) sera utilisé pour le circuit aval. Une fois la valeur de  $U_{d,t}(n_t)$  choisie, le circuit amont peut être intégralement résolu (voir plus loin). La tension aux bornes de la jonction

<sup>20</sup> Les indices «  $t$  » et «  $b$  » rappellent qu'ils représentent respectivement la partie supérieure (Top) et inférieure (Bottom) du circuit

de la cellule n°1 du circuit amont (*i.e.* au niveau du contact p) correspond alors à la tension appliquée aux bornes de la cellule  $n_b$  du circuit aval, *i.e.* la cellule située au niveau du contact p. Le courant injecté dans la résistance du cœur du circuit aval est par ailleurs égal au courant traversant la résistance du cœur de la cellule n°1 du circuit amont. Pour poursuivre la résolution, une inconnue est manquante : il s'agit du courant  $I_{coquille,b}(n_b)$  injecté par le contact dans la résistance de la coquille du circuit aval. Une nouvelle fois, la valeur adéquate se trouve par tâtonnement. On choisit donc une valeur d'essai et l'on résout alors le circuit aval. Plusieurs critères équivalents permettent ensuite de savoir si la valeur d'essai est correcte : mais tous consistent à vérifier la condition aux limites liée à la dimension finie du fil. Le premier critère consiste à poursuivre le calcul comme s'il y avait une cellule élémentaire supplémentaire en aval du circuit. Lorsque la valeur d'essai est correcte, le courant injecté dans la résistance de coquille de cette cellule virtuelle est nul. De façon similaire, un deuxième critère consiste à vérifier que le courant dans la résistance de la coquille de la dernière cellule est bien égal au courant traversant la dernière diode, ce dernier étant calculé à partir de la tension à ses bornes. Si le critère n'est pas vérifié, il faut choisir une nouvelle valeur d'essai. Lorsque le critère est vérifié, le système est entièrement résolu. Il faut alors comparer la valeur de la tension totale  $U$  obtenue avec celles de consigne. Lorsque la tension trouvée ne correspond pas à celle désirée, il faut choisir une nouvelle valeur pour la tension  $U_{d,t}(n_t)$  aux bornes de la diode la plus amont du circuit et réitérer jusqu'à convergence vers une solution satisfaisant la condition voulue sur la tension totale  $U$ .

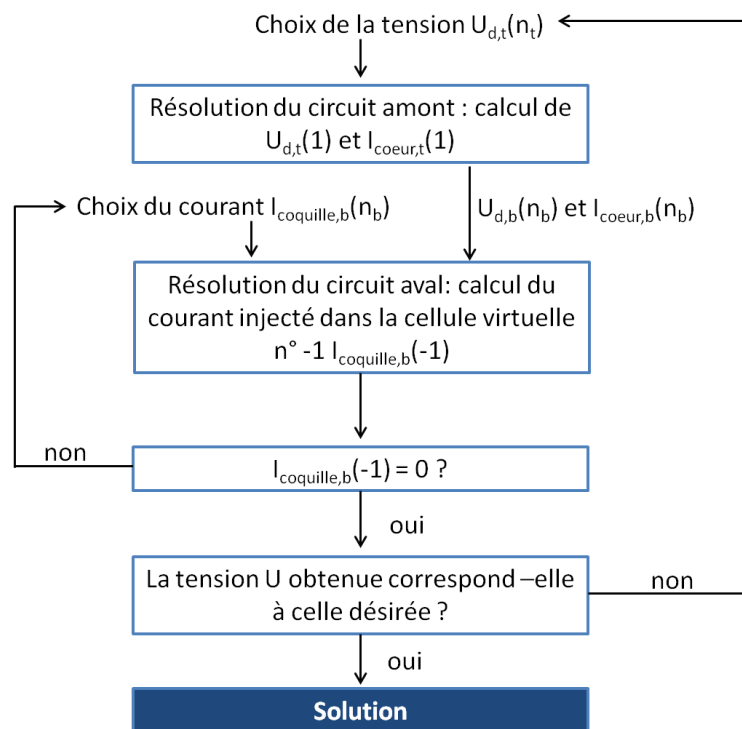


Figure 73 Schéma de l'algorithme utilisé pour résoudre le système présenté dans la Figure 72

La difficulté d'implémentation de l'algorithme réside dans la présence d'éléments fortement non linéaires dans le système (les diodes) qui rendent dans certains cas les solutions très sensibles à la valeur  $U_{d,t}(n_t)$  et facilement divergentes. Il y a plusieurs solutions face à cette difficulté : il faut chercher  $U_{d,t}(n_t)$  dans un domaine borné adéquat et adapter le maillage du fil en fonction de la solution que l'on s'attend à trouver. De plus, au cours de la recherche de la solution ou dans la

solution elle-même, certaines diodes peuvent être polarisées négativement. Hors, la tension à ses bornes devient mal définie lorsque le courant qui la traverse se rapproche de  $-I_{sat}$ . En effet, Matlab limitant le nombre de chiffre significatif à 15, lorsque le courant traversant la diode atteint  $I_{sat} (1 - 10^{-15})$ , la tension aux bornes de la diode correspondant à ce courant n'est plus calculable et conduit à une valeur  $-\infty$ . Pour contourner ce problème, on peut introduire une résistance de fuite en parallèle de la jonction suffisamment grande pour que le courant qui la traverse n'induisse qu'un effet négligeable (dans la simulation des profils EBIC par exemple, la redistribution du courant généré à travers ces résistances de fuites reste très petit devant le courant d'illumination total). De cette façon, lorsque le courant  $I_d$  traversant la diode est trop proche de  $-I_{sat}$ , on fait l'approximation qu'il est égale à  $-I_{sat}$  : la tension au borne de la diode est alors calculé à partir de la résistance de fuite et est égale à  $-R_{fuite}(I_j + I_{sat})$ .

## Résolution du circuit amont

Ce paragraphe décrit la manière dont sont calculés les courants et les tensions dans chaque cellule du circuit amont. Les conventions de signe utilisées sont indiquées dans la Figure 72.

Connaissant la tension  $U_{d,t}(n_t)$  aux bornes de la diode de la cellule la plus extrême du circuit amont, on peut en déduire le courant  $I_{j,t}(n_t)$  qui la traverse et la tension  $U_{j,t}(n_t)$  qui est à ses bornes. Le courant est la somme du courant de la diode, de la source de courant et de la résistance de fuite. On a donc :

$$I_{j,t}(n_t) = I_{d,t}(n_t) - I_{illum,t}(n_t) + \frac{U_{d,t}(n_t)}{R_{fuite,t}(n_t)},$$

Eq. 128

$$U_{j,t}(n_t) = U_{d,t}(n_t) + R_{serie,t}(n_t) \times I_{j,t}(n_t)$$

Eq. 129

où  $I_d(n_t)$  est le courant parcourant la diode  $n_t$  donné par l'équation Eq. 121. Dans le circuit amont, dans chaque cellule élémentaire n° jj, le courant parcourant le cœur est égal à celui s'écoulant dans la coquille  $I_{coeur,t}(jj) = I_{coquille,t}(jj)$ . De plus, dans le cas de la cellule  $n_t$  cette égalité se prolonge au courant de la jonction  $I_{j,t}(n_t)$ , on peut en déduire la tension aux bornes de la cellule  $n_t - 1$  :

$$U_{j,t}(n_t - 1) = U_{j,t}(n_t) + (R_{coquille,t}(n_t) + R_{coeur,t}(n_t)) \times I_{coeur,t}(n_t)$$

Eq. 130

En calculant ensuite le courant parcourant la jonction  $n_t - 1$ , on peut en déduire la tension aux bornes de la jonction  $n_t - 2$  et de fil en aiguille remonter jusqu'à la fin du circuit amont en utilisant les équations suivantes :

$$I_{coeur,t}(jj - 1) = I_{coeur,t}(jj) + I_{j,t}(jj - 1)$$

Eq. 131

$$U_{j,t}(jj - 1) = U_{j,t}(jj) + (R_{coquille,t}(jj) + R_{coeur,t}(jj)) \times I_{coeur,t}(jj)$$

Eq. 132

Le courant traversant la jonction noté  $I_{j,t}(jj - 1)$  dans l'équation Eq. 131 se calcule à partir de la tension  $U_{j,t}(jj - 1)$  à ses bornes. Il faut pour cela généralement résoudre une équation transcendante en raison de la présence combinée de la diode et de résistances dans la modélisation de la jonction.

## Résolution du circuit aval

Pour calculer les courants et tensions dans le circuit aval, il est nécessaire de connaître au départ trois grandeurs : le courant injecté par le circuit amont dans le cœur  $I_{coeur,b}(n_b) = I_{coeur,t}(1)$  ; la tension entre le cœur et la coquille au niveau du contact p qui est égale à  $U_{j,t}(1)$  et le courant injecté dans la coquille au niveau du contact  $I_{coquille,b}(n_b)$ . Ce dernier n'étant pas connu, il doit être trouvé par tâtonnement. On choisit donc initialement une valeur plausible pour  $I_{coquille,b}(n_b)$ . On peut alors en déduire la tension aux bornes de la jonction de la cellule  $n_b$  du circuit aval. D'après la loi des mailles, on a en effet :

$$U_{j,b}(n_b) = U_{j,t}(1) - R_{coquille,b}(n_b) \times I_{coquille,b}(n_b) + R_{coeur,b}(n_b) \times I_{coeur,b}(n_b)$$

Eq. 133

La différence de signe pour les tensions associées aux résistances du cœur et de la coquille provient de la convention de signe choisie pour l'orientation des courants qui est indiquée dans la Figure 72. Cette tension permet ensuite de calculer le courant traversant la jonction  $I_{j,b}(n_b)$ . On en déduit alors par la loi de conservation du courant les courants dans les résistances du cœur et de la coquille de la cellule suivante. Cette procédure étant ensuite valable pour les cellules suivantes, on utilise une indexation des cellules avec un indice générique  $jj$ :

$$I_{coquille,b}(jj) = I_{coquille,b}(jj + 1) - I_{j,b}(jj + 1)$$

Eq. 134

$$I_{coeur,b}(jj) = I_{coeur,b}(jj + 1) + I_{j,b}(jj + 1)$$

Eq. 135

La tension  $U_{j,b}(n_b - 1)$  peut être ensuite calculée en utilisant l'équation suivante, écrite avec l'indice générique  $jj$  :

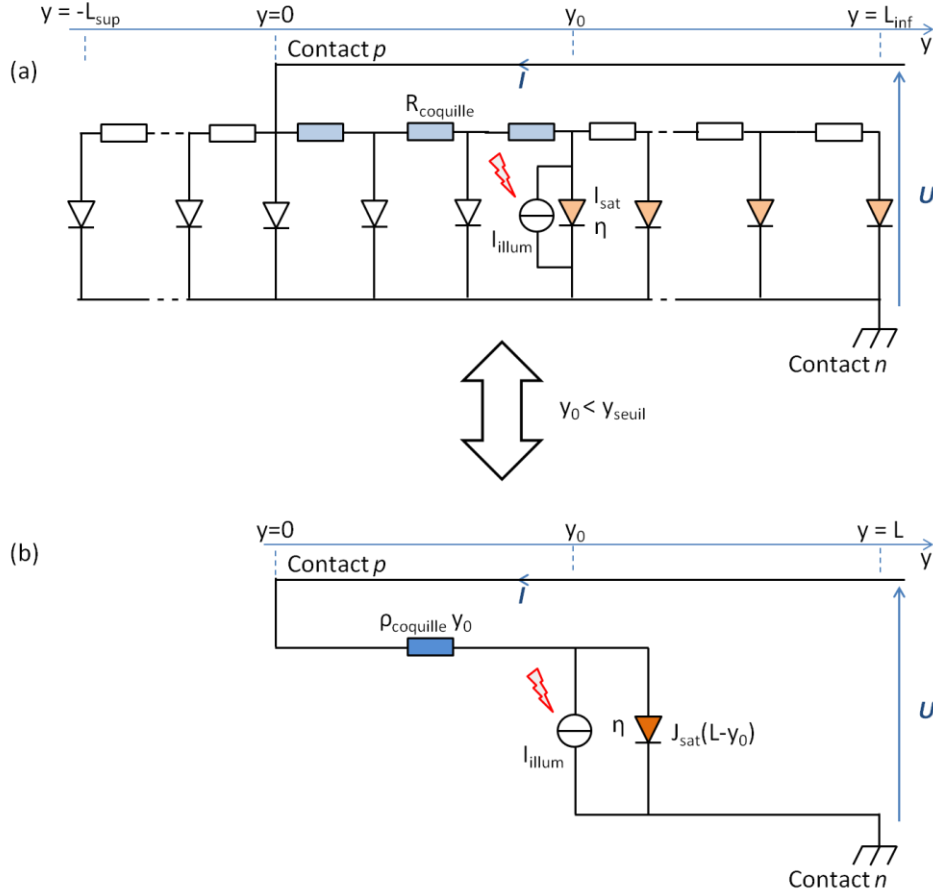
$$U_{j,b}(jj) = U_{j,b}(jj + 1) - R_{coquille,b}(jj) \times I_{coquille,b}(jj) + R_{coeur,b}(jj) \times I_{coeur,b}(jj)$$

Eq. 136

En répétant ce protocole, l'ensemble des tensions et courants dans le circuit aval est calculé de proche en proche. Une fois le calcul achevé, la tension aux bornes de la jonction dans la cellule n°1 du circuit aval qui a été déterminée à partir de l'équation Eq. 136 permet de calculer le courant  $I_{j,b}(1)$  qui traverse la jonction. Il faut alors vérifier que la valeur trouvée est égale au courant dans la coquille  $I_{coquille,b}(1)$  calculé à partir de l'équation Eq. 134. Si ce n'est pas le cas, cela indique que la valeur  $I_{coquille,b}(n_b)$  choisie au départ n'était pas la bonne.

## Annexe II-B

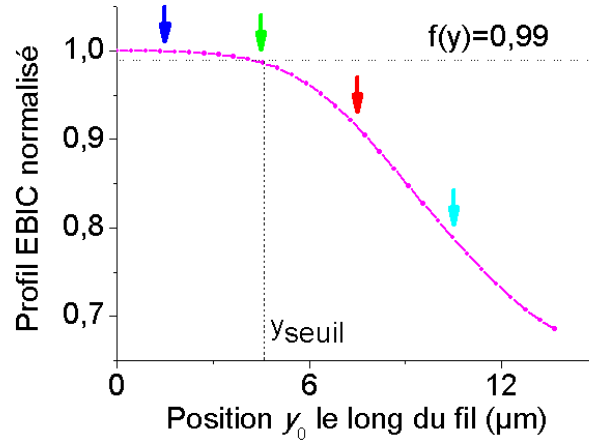
- Détermination analytique de la distance seuil au-delà de laquelle le signal EBIC décroît de façon significative dans le régime de la redistribution du courant dominée par les diodes -



**Figure 74 (a) Schéma équivalent du système étudié (b) Circuit équivalent simplifié lorsque l'on considère une position d'excitation  $y_0 < y_{seuil}$ .**

Considérons un système analogue à celui décrit dans la Figure 74(a) dans lequel les résistances de fuites sont négligées *i.e.* ont une valeur infinie. Supposons pour simplifier que les résistances du cœur sont nulles et que l'on applique une tension  $U = 0$  V aux bornes du dispositif. Dans ce cas, nous avons montré que les profils EBIC d'un tel système mettent en évidence un effet de seuil : lorsque le faisceau d'électrons excite une région proche du contact p, quasiment l'intégralité du courant est collectée. Le profil EBIC est donc plat dans cette région. En revanche, à partir d'une certaine distance seuil, notée  $y_{seuil}$ , le signal EBIC chute rapidement. Ce phénomène est illustré dans la Figure 75. Les paramètres utilisés dans la simulation sont indiqués dans la légende : le système simulé comprend 100 cellules élémentaires dont les paramètres des diodes sont identiques à ceux trouvés à partir de la courbe I-V ajustée présentée dans la Figure 61. La résistance de la coquille est fixée à  $3 \times 10^6 \Omega$  et 10 cellules sont excitées, générant chacune un courant de 1 nA. L'objectif de cette annexe est de déterminer de façon analytique  $y_{seuil}$  en fonction des paramètres du fil.





**Figure 75 Profil EBIC simulé à  $U=0$  V pour un système comportant 100 cellules élémentaires avec les paramètres suivants:  $I_{sat} = 1.2 \times 10^{-14}$  A ;  $\eta = 7.925$  ;  $R_{coquille} = 3 \times 10^6 \Omega$  ;  $R_{coeur} = 0 \Omega$  ;  $R_{fuite} = +\infty$  ;  $I_{illum} = 1$  nA (10 cellules sont excitées). Les flèches indiquent les points du profil EBIC correspondant aux courbes montrées dans la Figure 76.**

Le point clef consiste à comprendre comment le courant se redistribue au sein du fil. Pour cela, il faut estimer la valeur du potentiel électrique de la coquille externe en fonction de la position  $y$  le long de l'axe du fil pour une position  $y_0$  fixée de la région excitée ( $y_0$  est mesuré à partir du contact p). La Figure 76(a) montre ce potentiel  $V_{coquille-y_0}(y)$  calculé pour quatre positions  $y_0$  de la région excitée. A ces quatre positions correspondent quatre points sur le profil EBIC qui sont indiqués par des flèches dans la Figure 75. La courbe bleue foncée dans la Figure 76(a) correspond à une région excitée proche du contact ( $1.5 \leq y_0 \leq 3 \mu m$ ), pour laquelle le courant total redistribué est faible devant le courant d'illumination. Le point du profil EBIC qui correspond à cette région excitée est situé dans la zone plate du profil dans la Figure 75 (flèche bleue foncée). La courbe verte de la Figure 76(a) correspond à une région excitée un peu plus loin du contact ( $4.5 \leq y_0 \leq 6 \mu m$ ). La redistribution du courant est encore faible. Le point correspondant à cette région dans le profil EBIC est situé à l'extrémité de la zone plate du profil (flèche verte dans la Figure 75) : il est donc situé au niveau du seuil que l'on a défini précédemment de façon qualitative. Les courbes rouge et cyan de la Figure 76(a) correspondent à des régions excitées éloignées du contact ( $7.5 \leq y_0 \leq 9 \mu m$  et  $10.5 \leq y_0 \leq 12 \mu m$  respectivement) pour lesquelles la redistribution du courant généré devient de plus en plus significative, comme on peut le remarquer sur la Figure 75 (flèches rouge et cyan).

Lorsque la redistribution du courant est faible (courbes bleue foncée et verte), on constate que le potentiel électrique suit tout d'abord une progression linéaire entre le contact et la région excitée puis est constant entre la région excitée et l'extrémité de la jonction. La pente du profil dans la partie linéaire ne dépend pas de la position de la zone excitée : c'est la même pour les courbes bleue foncée et verte. Ce comportement provient du fait que le courant s'écoule sans perte entre la zone de génération et le contact. Par conséquent, sachant que le contact p est à la masse puisque l'on suppose  $U = 0$  V, le potentiel dans la coquille s'exprime simplement à partir de la loi d'Ohm :

$$V_{coquille}(y \leq y_0) = I_{illum,tot} \cdot \rho_{shell} \cdot y ,$$

**Eq. 137**

où  $\rho_{shell}$  représente la résistance de la coquille par unité de longueur le long de l'axe du fil et  $I_{illum,tot}$  le courant d'illumination total (i.e. la somme des courants d'illumination des diodes

excitées). Par la suite, on mentionnera cette grandeur simplement sous le terme « résistivité » de la coquille. En terme de circuit équivalent, le fait que la redistribution du courant soit négligeable dans la région  $y < y_0$  fait que l'on peut ne pas prendre en compte les diodes de cette région et fusionner les résistances de la coquille en une seule résistance de valeur  $\rho_{coquille} y_0$  comme cela est illustré dans la Figure 74(b).

Dans la partie située entre la zone excitée et l'extrémité de l'hétérostructure, *i.e.* pour  $y > y_0$ , le courant qui s'écoule dans la coquille est négligeable. Par conséquent, d'après la loi d'Ohm, le potentiel de la coquille est constant. La continuité du potentiel en  $y = y_0$  impose donc :

$$V_{coquille}(y > y_0) = I_{illum,tot} \cdot \rho_{shell} \cdot y_0$$

**Eq. 138**

Etant donné que la résistance du cœur est supposée nulle et que le contact  $n$  est relié à la masse, le potentiel électrique du cœur  $V_{cœur}(y)$  est égal à 0 V quelque soit  $y$ . Par définition, le courant redistribué correspond à une fraction du courant d'illumination qui s'écoule à travers la jonction au lieu d'atteindre le contact. Il est donc égal à la différence entre le courant traversant les diodes en présence de l'excitation et le courant d'obscurité (*i.e.* le courant sans excitation). Lorsque l'on considère les diodes excitées, il faut bien sûr soustraire au courant total sous excitation le courant d'illumination pour en déduire la partie redistribuée. Dans le cas présent, on suppose que la tension appliquée aux bornes du dispositif est nulle. Il n'y a donc pas de courant d'obscurité. On peut donc appliquer directement l'équation Eq. 121 pour calculer le courant redistribué en notant que  $U_d(y) = V_{coquille}(y) - V_{cœur}(y) = V_{coquille}(y)$ . Celui-ci est tracé pour chacune des quatre positions de la zone d'excitation dans la Figure 76(b-e). On remarquera, qu'en raison de la dépendance exponentielle dans la caractéristique I-V de la diode, le courant redistribué varie de plusieurs ordres de grandeur entre les quatre cas étudiés : pour la zone d'excitation la plus proche du contact, le maximum du courant redistribué vaut  $9 \times 10^{-13} A$  (courbe b) alors que pour la zone d'excitation la plus éloignée, il atteint  $1.8 \times 10^{-10} A$  (courbe e). Une autre remarque d'importance est que la redistribution du courant est bien plus grande dans la région située entre la zone excitée et l'extrémité de l'hétérostructure qu'entre le contact et la zone excitée. On a donc en quelque sorte un résultat contre-intuitif et quelque peu paradoxal : la redistribution du courant est la plus forte dans la région parcourue par les courants les plus faibles. Pour estimer de façon assez grossière le courant total redistribué  $I_{redistribué}(y_0)$ , qui est égal à la somme des courants redistribués dans toutes les diodes, on peut donc négliger la redistribution du courant entre le contact et la zone excitée. Or, comme on vient de le voir, tant que le courant redistribué reste faible devant le courant d'illumination, les diodes entre la zone excitée et la fin de l'hétérostructure (*i.e.*  $y > y_0$ ) sont au même potentiel (potentiel plat) et donc contribuent de la même façon : elles se comportent donc comme une seule diode dont le courant de saturation est égal à la somme des courants de saturation de toutes ces diodes, comme illustré dans la Figure 74(b). Le courant redistribué est donc :

$$I_{redistribué}(y_0) \approx J_{sat} \cdot (L - y_0) \left[ \exp\left(\frac{eU_d(y_0)}{\eta k_b T}\right) - 1 \right],$$

**Eq. 139**

où  $J_{sat}$  correspond au courant de saturation de la jonction par unité de longueur le long de l'axe du fil,  $L$  est la distance entre le contact et l'extrémité de l'hétérostructure et  $y_0$  est la position de la

région excitée. Il faut garder en tête que cette équation n'est valable que pour  $0 \leq y_0 \leq y_{seuil}$ , c'est-à-dire lorsque la redistribution du courant est négligeable devant le courant d'illumination. On peut écrire cette condition de la façon suivante :  $I_{redistribué} \ll I_{illum,tot} \Leftrightarrow I_{redistribué} \leq \beta \cdot I_{illum,tot}$  où  $\beta$  est constante que l'on choisit pour définir la notion de « négligeable ». Par exemple, on peut prendre  $\beta = 0.01$ . Au seuil, on a par définition :

$$I_{redistribué}(y_{seuil}) = \beta \cdot I_{illum,tot}$$

**Eq. 140**

En insérant l'équation Eq. 140 dans l'équation Eq. 139, on peut donc en déduire la valeur de la tension seuil aux bornes des diodes:

$$U_{d,seuil} \approx \frac{\eta k_b T}{e} \ln \left( 1 + \frac{\beta \cdot I_{illum,tot}}{J_{sat} \cdot (L - y_{seuil})} \right)$$

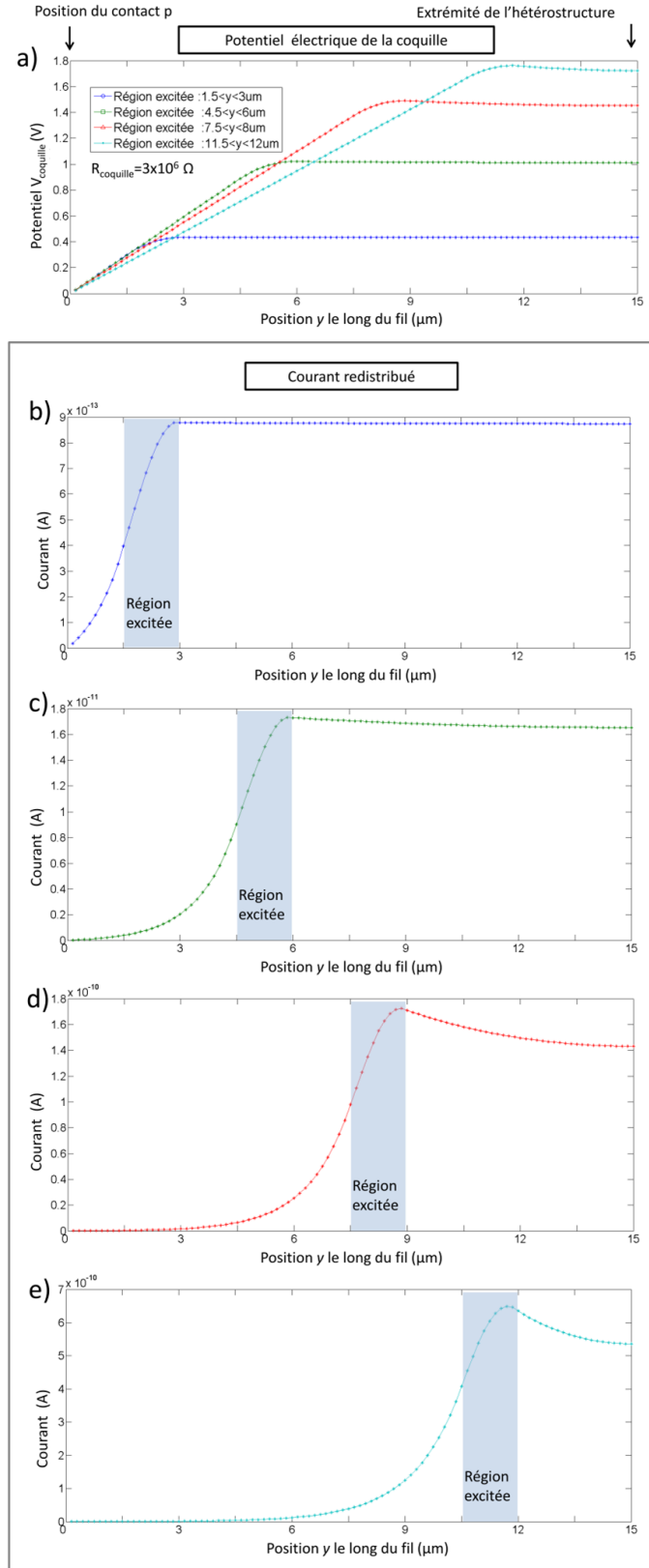
**Eq. 141**

On remarque que lorsque  $L$  augmente  $U_{d,seuil}$  tend vers 0. La dimension finie du système est donc nécessaire pour que l'on observe l'effet de seuil. La distance seuil peut être déduite en insérant l'équation Eq. 138 dans l'équation précédente. On obtient alors l'équation transcendante suivante :

$$y_{seuil} \sim \frac{\eta k_b T}{e \cdot I_{illum,tot} \cdot \rho_{shell}} \ln \left( 1 + \frac{\beta \cdot I_{illum,tot}}{J_{sat} \cdot (L - y_{seuil})} \right)$$

**Eq. 142**

Pour finir, on remarquera qu'au-delà du seuil, lorsqu'elle reste modérée, la redistribution de courant suit un schéma similaire à celui observé sous le seuil : la grande majorité du courant se redistribue entre la zone excitée et la fin de l'hétérostructure, avec une concentration du courant de plus en plus marquée au niveau de la zone excitée. La redistribution du courant entre le contact et la zone excitée reste négligeable, ce qui se traduit par un potentiel variant linéairement dans cette région.

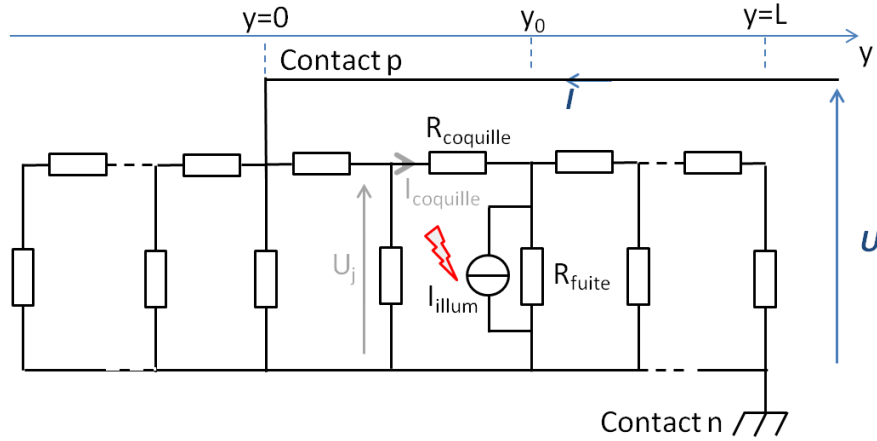


**Figure 76 a) Potentiel électrique de la coquille en fonction de la position  $y$  le long de l'axe du fil simulé en condition de court-circuit pour quatre régions excitées différentes. La position  $y=0$  correspond au contact  $p$  sur la coquille. (b-e) Redistribution du courant en fonction de la position  $y$  le long de l'axe du fil pour chacune des quatre régions excitées. Une attention particulière doit être portée aux échelles du courant redistribué qui varie de  $9 \times 10^{-13}$  A quand la région excitée est comprise en les positions  $1.5 < y < 3 \mu\text{m}$  et jusqu'à  $7 \times 10^{-10}$  A quand la région excitée est comprise en les positions  $10.5 < y < 12 \mu\text{m}$ .**

## Annexe II-C

### - Détermination de la solution analytique donnant le profil EBIC dans le régime dominé par les fuites -

L'objectif de cette annexe est de déterminer analytiquement le profil EBIC dans le cas limite où la redistribution du courant généré dans la jonction est dominée par les fuites. Le circuit électrique équivalent du système que l'on veut étudier est représenté dans la Figure 77. Ce cas a été discuté dans la section 3.7. On suppose que les fuites sont réparties de façon homogène le long de la structure : la résistance de fuite  $R_{fuite}$  est la même pour toutes les cellules élémentaires. Pour simplifier, on suppose également que la résistance du cœur est nulle. De ce fait, le circuit correspondant à la partie située entre le contact p et le sommet du fil est équivalent au circuit de la partie située entre le contact p et le pied du fil. Dans la suite, on ne s'intéressera seulement au deuxième circuit (correspondant à la région  $y \geq 0$  dans la Figure 77). Le courant traversant les diodes étant supposé négligeable devant le courant traversant les résistances de fuites, les diodes ne sont pas prises en compte dans le circuit électrique équivalent. Cependant, la jonction p-n génère toujours un courant sous l'effet de l'excitation par le faisceau d'électron. On introduit pour cela une source de courant à la position  $y_0$  d'excitation.



**Figure 77** Circuit équivalent du système étudié. La jonction illuminée à la position  $y_0$  génère un courant  $I_{illum}$  représenté par la source de courant.

L'utilisation d'un modèle discrétisé n'est pas tout à fait adaptée pour déterminer la solution analytique du profil EBIC. Il est préférable d'utiliser un modèle continu décrit par des équations différentielle. Dans notre cas, en utilisant les conventions de signes indiquées sur la Figure 77 pour l'orientation de l'axe  $y$ , le courant parcourant la coquille  $I_{coquille}$  et la tension aux bornes de la jonction  $U_j$ , le système que l'on étudie est régi par les équations suivantes :

$$\frac{dI_{coquille}}{dy} = -J$$

Eq. 143

$$U_j = V_{coquille} - V_{coeur} = V_{coquille}$$

Eq. 144

$$\frac{dV_{coquille}}{dy} = -\rho_{coquille} I_{coquille}$$

Eq. 145

$$U_j(y) = \rho_{fuite} \cdot (J + I_{illum} \delta(y - y_0))$$

Eq. 146

L'équation Eq. 143 provient de la loi de conservation du courant.  $J$  correspond à la densité de courant traversant la jonction. Par convention,  $J$  est orienté positivement lorsque le courant est injecté de la coquille vers le cœur (convention classique pour les LEDs). L'équation Eq. 144 est la définition de la tension aux bornes de la jonction p-n en accord avec la convention choisie dans la Figure 77. Le cœur ayant une résistance nulle et étant connecté à la masse, on a  $V_{cœur}(y) = 0$  V. L'équation Eq. 145 est l'écriture de la loi d'Ohm pour la coquille.  $\rho_{coquille}$  est la résistance de la coquille par unité de longueur le long de l'axe  $y$  et s'exprime en  $\Omega.m^{-1}$ . Le signe "-" découle du choix de l'orientation de l'axe  $y$  et de la convention de signe pour  $I_{coquille}$  qui est positif lorsque le courant s'écoule dans le sens de l'axe  $y$ . L'équation Eq. 146 est la loi d'Ohm pour la jonction, en prenant en compte la source de courant liée au courant d'illumination, supposée ponctuelle et située en  $y = y_0$ .  $\delta$  est la fonction de Dirac et  $\rho_{fuite}$  est la « résistivité de fuite<sup>21</sup> » en  $\Omega.m$ . En exprimant  $J$  en fonction de  $V_{coquille}$  (équations Eq. 143 et Eq. 145), en injectant le résultat dans l'équation Eq. 146 et en remarquant que, d'après l'équation Eq. 144,  $V_{coquille} = U_j$ , on aboutit à l'équation différentielle suivante :

$$\frac{d^2 U_j}{dy^2} - \alpha^2 U_j = -\rho_{coquille} I_{illum} \delta(y - y_0),$$

Eq. 147

où  $\alpha$  est une constante homogène à l'inverse d'une longueur définie par  $\alpha = \sqrt{\frac{\rho_{coquille}}{\rho_{fuite}}}$ . Une solution particulière que l'on peut calculer en utilisant la transformée de Fourier et le théorème des résidus est par exemple :

$$U_{j,part} = \begin{cases} y < y_0, & \frac{\sqrt{\rho_{coquille}\rho_{fuite}}}{2} I_{illum} e^{\alpha(y-y_0)} \\ y > y_0, & \frac{\sqrt{\rho_{coquille}\rho_{fuite}}}{2} I_{illum} e^{-\alpha(y-y_0)} \end{cases}$$

Eq. 148

Une solution homogène de l'équation Eq. 147 est par exemple :

$$U_{j,hom} = Ae^{\alpha y} + Be^{-\alpha y},$$

où A et B sont deux constantes. La solution  $U_j$  pour le système que l'on étudie est la somme de la solution particulière  $U_{j,part}$  et de la solution homogène  $U_{j,hom}$ . Les valeurs des constantes A et B

---

<sup>21</sup> Pour une longueur de jonction L donnée le long de l'axe  $y$ , la résistance de fuite  $R_{fuite}$  est égale à  $\frac{\rho_{shunt}}{L}$ .

sont déterminées par les conditions aux limites, qui sont dans notre cas  $U_j(y = 0) = U$  et  $I_{coquille}(y = L) = 0$  où  $U$  est la tension appliquée aux bornes du circuit. La deuxième condition aux limites se ramène à une condition sur  $U_j$  en utilisant les équations Eq. 144 et Eq. 145 . Cela donne :

$$I_{coquille}(y) = -\frac{1}{\rho_{coquille}} \frac{dU_j}{dy}$$

**Eq. 149**

On obtient alors les conditions aux limites suivantes :

$$\begin{cases} U_j(y = 0) = U \\ \frac{dU_j}{dy}(y = L) = 0 \end{cases}$$

**Eq. 150**

En remplaçant  $U_j$  par  $U_{j,part} + U_{j,hom}$ , on aboutit aux valeurs suivantes pour les constantes A et B :

$$\begin{cases} A = \frac{1}{e^{2\alpha L} + 1} U + V_{illum} \frac{e^{\alpha y_0} + e^{-\alpha y_0}}{e^{2\alpha L} + 1} \\ B = \frac{e^{2\alpha L}}{e^{2\alpha L} + 1} U - V_{illum} \frac{e^{\alpha(2L-y_0)} + e^{-\alpha y_0}}{e^{2\alpha L} + 1} \end{cases}$$

**Eq. 151**

où  $V_{illum} = \frac{\sqrt{\rho_{coquille}\rho_{fuite}}}{2} I_{illum}$ . Le courant total  $I$  injecté dans le circuit est donné par la valeur de  $I_{coquille}$  en  $y = 0$ . Après calcul en utilisant l'équation Eq. 149, on obtient :

$$I = \frac{\alpha \cdot th(\alpha L)}{\rho_{coquille}} U - I_{illum} \frac{(e^{2\alpha L} e^{-\alpha y_0} + e^{\alpha y_0})}{e^{2\alpha L} + 1}$$

**Eq. 152**

$th$  est la fonction tangente hyperbolique. Le courant EBIC est la différence entre le courant total mesuré avec et sans l'excitation. Il est donc donné par :

$$I_{EBIC}(y_0) = -I_{illum} \frac{(e^{2\alpha L} e^{-\alpha y_0} + e^{\alpha y_0})}{e^{2\alpha L} + 1}$$

**Eq. 153**

Le profil EBIC obtenu dépend de façon exponentielle de la position  $y_0$  excitée et est indépendant de la tension appliquée  $U$ . On remarquera que le caractère exponentiel se retrouve également dans le profil de redistribution du courant donné par  $U_j(y)/\rho_{fuite}$  (cf. équations Eq. 148 et Eq. 151): le courant redistribué décroît exponentiellement de part et d'autre de la position excitée  $y_0$ . Cela est conforme à l'idée intuitive selon laquelle le courant, à mesure qu'il s'écoule dans la coquille, se redistribue dans la jonction proportionnellement à sa valeur locale.

Par ailleurs, l'équation Eq. 153 indique que le profil normalisé ne dépend pas du courant d'illumination  $I_{illum}$ . Ces propriétés sont des conséquences directes de la linéarité des résistances et

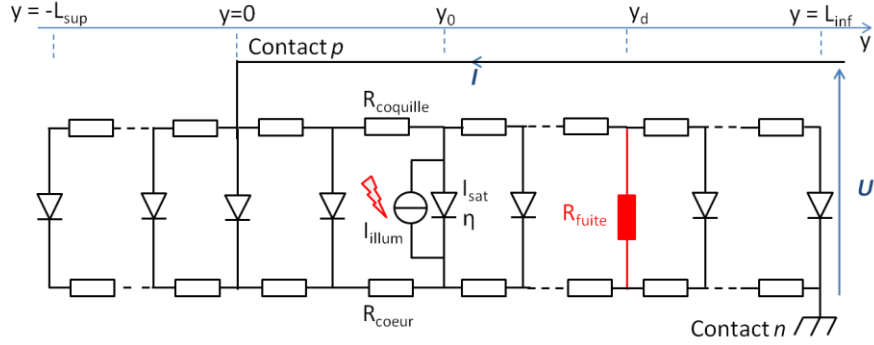
du théorème de superposition qui est valable dans ce cas : le courant d'obscurité et le courant EBIC se superposent dans le circuit sans s'influencer mutuellement.



## Annexe II-D

### - Détermination du profil EBIC en présence d'un défaut ponctuel et application à la détermination expérimentale du profil de résistivité du cœur et de la coquille -

L'objectif de cette annexe est d'établir analytiquement le profil EBIC dans un système qui possède un défaut ponctuel induisant une fuite de courant. Le circuit équivalent du système que l'on souhaite étudier est présenté dans la Figure 78. La position le long du fil est repéré par l'axe  $y$ . L'origine  $y = 0$  est placée au niveau du contact  $p$ . On suppose que le défaut est localisé à la position  $y_d$ . Il est caractérisé par une résistance  $R_{fuite}$ . Le reste de la structure est supposé idéal (aucune fuite). On note  $L_{sup}$  (resp.  $L_{inf}$ ) la distance entre le contact  $p$  et la fin de l'hétérostructure du côté du contact  $n$  (resp. le sommet du nanofil). Le domaine  $-L_{sup} \leq y \leq 0$  correspond donc à la partie du fil située entre son sommet et le contact  $p$ . La position de la zone excitée par le faisceau d'électron est notée  $y_0$ .



**Figure 78** Schéma équivalent du circuit étudié. Le défaut modélisé par une résistance de fuite est localisé à l'extrémité du circuit. La diode située en  $y = y_0$  est excitée et génère un courant  $I_{illum}$  modélisé par une source de courant.

On a démontré dans l'annexe B qu'en raison de la caractéristique exponentielle de la jonction, la redistribution du courant généré par l'excitation du faisceau est soumise à un effet de seuil : tant que le potentiel électrique de la coquille n'atteint pas une certaine valeur seuil (cf. équation Eq. 141), le courant redistribué à travers les diodes est négligeable devant  $I_{illum}$ . Plaçons-nous dans un tel cas : de cette façon, le profil EBIC que l'on calcule est uniquement du à l'effet de la fuite ponctuelle. Pour cela, il suffit que le courant d'illumination soit suffisamment faible ou que la tension appliquée  $U$  soit suffisamment petite<sup>22</sup>.

### Défaut localisé à la fin de la partie inférieure de l'hétérostructure ( $y_d = L_{inf}$ )

<sup>22</sup> cf. annexe B et section 3.3 pour une analyse plus rigoureuse

Pour commencer par un cas simple, on suppose que le défaut est situé à la fin de l'hétérostructure en  $y_d = L_{inf}$  (i.e. extrémité du circuit aval) et que l'on mesure le profil EBIC avec une tension appliquée  $U$  nulle. Le cas  $U \neq 0$  sera discuté plus loin.

### Profil lorsque la position d'excitation est situé entre le contact et le défaut ( $0 \leq y_0 \leq y_d$ )

On suppose que le faisceau excite la jonction à la position  $y_0$  tel que  $0 \leq y_0 \leq y_d$ . Si la redistribution à travers les diodes du courant généré sous l'effet de l'excitation est négligeable, le courant n'a que deux chemins possibles : i) rejoindre le contact  $p$  en s'écoulant le long de la coquille ou ii) rejoindre le contact  $n$  en passant par la coquille puis par le défaut. Le circuit devient donc équivalent à celui présenté dans la Figure 79(a) dont un schéma simplifié est indiqué dans la Figure 79(b). L'orientation des courants est choisie de façon à être en accord avec les conventions décidées précédemment. A partir du circuit équivalent, la valeur du courant EBIC collecté par le contact  $p$  se calcule en utilisant l'équation de conservation du courant et l'unicité du potentiel au nœud du circuit. En utilisant les notations de la Figure 79(b), on a ainsi :

$$\begin{cases} I_{illum} + I_{EBIC} - I_{fuite} = 0 \\ V = R_2 I_{fuite} = -R_1 I_{EBIC} \end{cases}$$

Eq. 154

On en déduit donc l'expression du courant EBIC en fonction de la position d'excitation  $y_0$  :

$$\forall y_0 \geq 0, \quad I_{EBIC}(y_0) = -\frac{R_2}{R_1 + R_2} I_{illum} = -I_{illum} \left( 1 - \frac{\rho_{coquille}}{R_{fuite} + \rho_{coquille} L_{inf}} y_0 \right),$$

Eq. 155

Le profil EBIC dépend donc linéairement de la position d'excitation  $y_0$ . Lorsque  $y_0$  tend vers 0, i.e. pour des zones excitées proche du contact  $p$ , le courant EBIC tend vers  $-I_{illum}$  : les fuites à travers le défaut tendent donc vers 0. Lorsque  $y_0$  tend vers  $L_{inf}$ , ce qui correspond à la position du défaut, le courant EBIC tend vers  $-I_{illum} \frac{R_{fuite}}{R_{fuite} + \rho_{coquille} L_{inf}}$ . Cela indique comme attendu que plus la résistance de fuite est élevée, plus le courant collecté est important. A l'inverse, quand la résistance de fuite tend vers 0 (court-circuit), le signal EBIC tend vers 0 au niveau du défaut. On remarquera que le profil EBIC obtenu ne dépend pas de la résistivité du cœur.

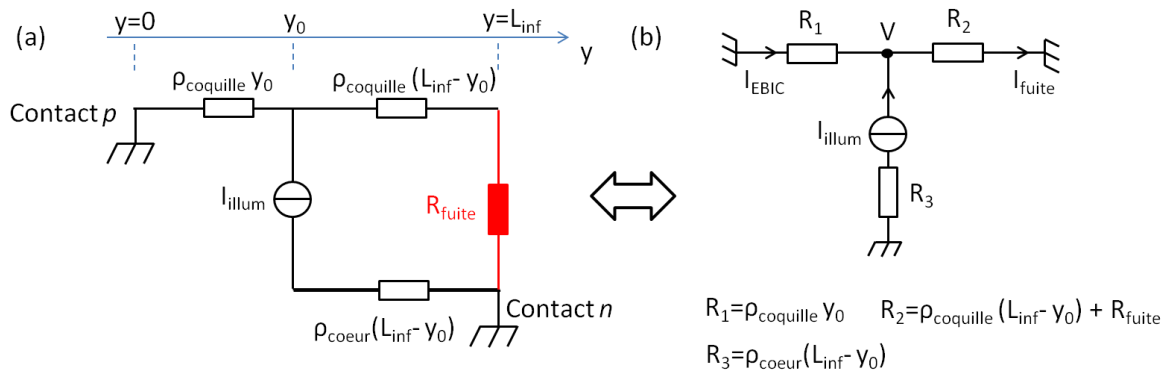


Figure 79 (a) Schéma équivalent du circuit lorsque la diode excitée est située entre le contact  $p$  et le défaut et une fois pris en compte le fait que la redistribution dans les diodes est négligeable. (b) Représentation simplifiée du même circuit.

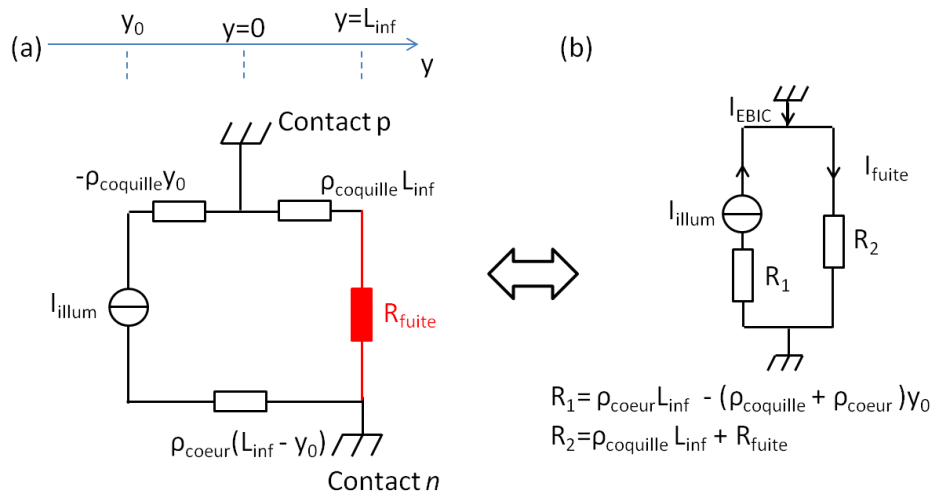
**Profil lorsque la position d'excitation est situé entre le contact et le sommet du fil**  
 **$(-L_{sup} \leq y_0 \leq 0)$**

L'équation Eq. 155 n'est valable que pour  $0 \leq y_0 \leq L_{inf}$ . Etudions désormais l'impact du défaut sur le signal EBIC dans la partie  $-L_{sup} \leq y_0 \leq 0$ . La même approche que précédemment conduit au circuit équivalent montré dans la Figure 80. On remarque alors que l'on n'a nécessairement  $I_{fuite} = 0$  et donc :

$$\forall y_0 \leq 0, \quad I_{EBIC}(y_0) = -I_{illum}$$

**Eq. 156**

Le profil EBIC est donc plat entre le contact et le sommet du fil. Le défaut n'a donc aucun impact sur le profil EBIC.



**Figure 80 (a) Schéma électrique équivalent du système excité dans la région  $y_0 < 0$  et possédant un défaut ponctuel en  $y = L_{inf}$ . On suppose que la redistribution du courant dans les diodes est négligeable. (b) Schéma équivalent simplifié**

**Profil EBIC dans le cas  $U \neq 0$  V**

Lorsque la tension  $U$  n'est plus nulle, le cœur et la coquille sont parcourus respectivement par un courant  $I_{coq-obs}(y)$  et  $I_{coeur-obs}(y)$ . Ils ne sont donc plus équipotentiels. Malgré cela, si l'on suppose que la redistribution du courant généré sous excitation est négligeable à travers les diodes, le raisonnement fait à  $U = 0$  V reste valable et on obtient exactement les mêmes profils EBIC. Pour s'en convaincre, on peut déterminer comment le potentiel  $V_{coquille}(y)$  dans la coquille ( $V_{coeur}(y)$  dans le cœur) est modifié sous excitation. En utilisant les équations Eq. 143 et Eq. 145, on peut écrire :

$$\frac{d^2 V_{coquille}}{dy^2} = \rho_{coquille} J$$

**Eq. 157**

$J$  est la densité de courant traversant la jonction. Les conditions aux limites pour cette équation sont les mêmes que celles données par l'équation Eq. 150 à savoir  $V_{coquille}(y = 0) = U$  et  $\frac{dV_{coquille}}{dy}(y =$

$L_{inf}) = 0$ . Si l'on suppose que la redistribution dans les diodes du courant généré par l'excitation du faisceau est négligeable,  $J$  est donc partout égal à la densité de courant dans la jonction sans excitation  $J_{obs}$  exceptée en  $y = y_0$  où le courant est généré et en  $y = y_d$  au niveau du défaut. On peut donc écrire :

$$J = J_{obs} + J_{exc}$$

**Eq. 158**

où

$$J_{exc} = -I_{illum} \delta(y - y_0) + I_{fuite} \delta(y - y_d)$$

**Eq. 159**

$\delta$  est la fonction de Dirac et  $I_{fuite}$  est la partie du courant d'illumination qui se redistribue dans le défaut. En insérant l'équation Eq. 158 dans l'équation Eq. 157, et en utilisant le fait que cette dernière est linéaire et que le théorème de superposition s'applique, on peut alors écrire que le potentiel de la coquille est la somme du potentiel en l'absence d'excitation  $V_{coquille, obs}$  et d'un potentiel additionnel lié à l'excitation  $V_{coquille, exc}$  qui vérifie les équations et conditions aux limites suivantes :

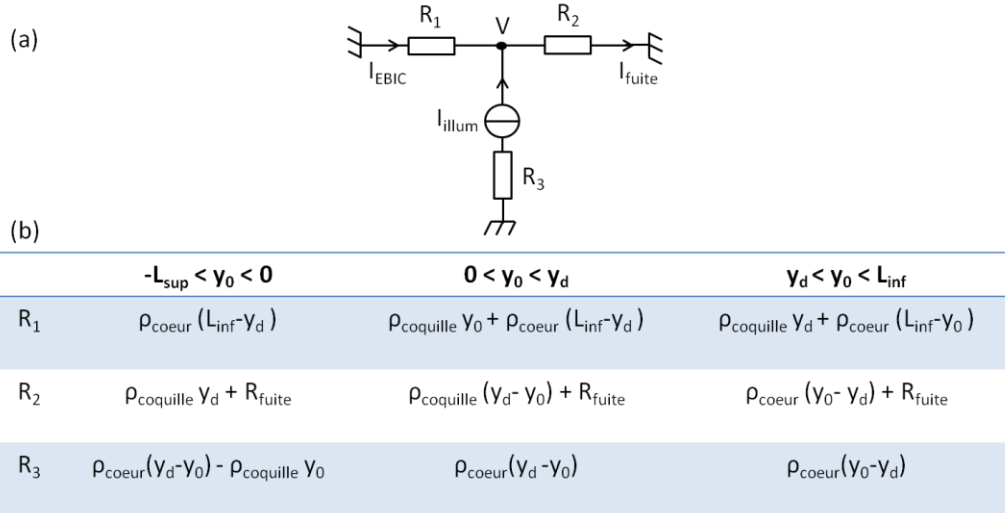
$$\begin{cases} \frac{d^2 V_{coquille, exc}}{dy^2} = \rho_{coquille} J_{exc} \\ V_{coquille, exc}(y = 0) = 0 \\ \frac{dV_{coquille, exc}}{dy}(y = L_{inf}) = 0 \end{cases}$$

**Eq. 160**

Comme on peut le remarquer, ces équations sont indépendantes de la tension appliquée  $U$ . Par conséquent, ni le potentiel  $V_{coquille, exc}$  ni le courant de fuite donné par  $I_{fuite} = V_{coquille, exc}(y = y_d)/R_{fuite}$  n'en dépendent. On a donc démontré que le profil EBIC est également indépendant de  $U$ . La démonstration a été faite dans le cas où le défaut ponctuel est situé en  $y_d = L_{inf}$  mais elle reste valide dans les autres cas étudiés par la suite.

## **Défaut localisé sur la partie inférieure de l'hétérostructure ( $0 \leq y_d < L_{inf}$ )**

Considérons désormais le cas où le défaut est localisé sur la partie inférieure de l'hétérostructure mais pas nécessairement à son extrémité. Il y a trois configurations possibles pour la position relative de la région illuminée par rapport au contact p et au défaut : dans la partie supérieure du fil ; entre le contact p et le défaut et entre le défaut et la fin de l'hétérostructure dans la partie inférieure. Un raisonnement similaire à celui effectué dans la section précédente aboutit à des circuits équivalents pour chacune de ces configurations. Elles s'avèrent être décrite par un même type de circuit équivalent qui montré dans la Figure 81(a). Ce circuit est semblable à celui étudié auparavant. Les paramètres  $R_1$ ,  $R_2$  et  $R_3$  pour chacune des configurations sont montrés dans le tableau de la Figure 81(b).



**Figure 81 (a) Circuit équivalent lorsque l'on considère le signal EBIC généré dans un système avec une fuite ponctuelle localisée en  $y_d$  tel que  $0 \leq y_d < L_{inf}$ . En fonction de la position  $y_0$  de la région excitée, les paramètres du circuit change. Ils sont indiqués dans le tableau (b).**

On a montré précédemment que le profil EBIC est égal pour ce type de circuit équivalent à  $-\frac{R_2}{R_1 + R_2} I_{illum}$  (cf. Eq. 155). On en déduit donc que les profils EBIC sont donnés par les formules suivantes :

$$I_{EBIC}(y_0) = \begin{cases} -I_{illum} R_I^{-1} (R_{fuite} + \rho_{coquille} y_d) & \text{pour } -L_{sup} \leq y_0 \leq 0 \\ -I_{illum} R_I^{-1} (R_{fuite} + \rho_{coquille} (y_d - y_0)) & \text{pour } 0 \leq y_0 \leq y_d \\ -I_{illum} R_I^{-1} (R_{fuite} + \rho_{coeur} (y_0 - y_d)) & \text{pour } y_d \leq y_0 \leq L_{inf} \end{cases}$$

**Eq. 161**

où  $R_I = R_{fuite} + \rho_{coquille} y_d + \rho_{coeur} (L_{inf} - y_d)$ . Plusieurs caractéristiques sont à relevées.

- D'une part, le signal EBIC est constant sur la partie supérieure du fil mais la redistribution du courant généré dans le défaut n'est pas nulle pour autant : l'efficacité de transport vaut  $R_I^{-1} (R_{fuite} + \rho_{coquille} y_d)$ . On vérifie qu'elle tend vers 1 lorsque  $y_d$  tend vers  $L_{inf}$ .
- Le profil EBIC est linéaire par morceaux sur la partie inférieure du fil. Le profil décroît du contact p jusqu'au défaut. Le coefficient directeur de la pente est proportionnel à la résistivité de la coquille  $\rho_{coquille}$ .
- D'une façon qui peut paraître assez contre-intuitive à première vue, le signal augmente ensuite entre le défaut et la fin de l'hétérostructure. Le coefficient directeur dans cette portion est proportionnel à la résistivité du cœur  $\rho_{coeur}$ . Donc plus la résistance du cœur est importante, plus le signal collecté est fort dans cette région ! De plus, même s'il y avait un court-circuit au niveau du défaut ( $R_{fuite} = 0$ ), une partie du courant généré entre le défaut et la fin de l'hétérostructure serait collecté en EBIC.
- Le minimum du profil EBIC se situe au niveau du défaut et est une mesure indirecte de la « force » de la fuite : plus la fuite est importante plus le courant sera faible. Il atteint zéro dans le cas limite d'un court-circuit.

## Défaut localisé sur la partie supérieure de l'hétérostructure ( $-L_{sup} \leq y_d < 0$ )

Supposons désormais que le défaut est localisé dans la partie supérieure de l'hétérostructure. Le circuit équivalent, quelque que soit la position de la région excitée, est analogue à celui de la Figure 81(a). Les valeurs des résistances  $R_1$ ,  $R_2$  et  $R_3$  sont présentées dans le Tableau 10.

**Tableau 10 Paramètres des circuits équivalents en EBIC lorsque l'on considère une fuite ponctuelle localisée sur la partie supérieure du fil (i.e.  $y_d < 0$ ). Ces paramètres se réfèrent au schéma de la Figure 81(a).**

	$-L_{sup} < y_0 < y_d$	$y_d < y_0 < 0$	$0 < y_0 < L_{inf}$
$R_1$	$\rho_{coeur} (L_{inf} - y_d) - \rho_{coquille} y_d$	$\rho_{coeur} (L_{inf} - y_0) - \rho_{coquille} y_0$	$\rho_{coeur} (L_{inf} - y_0)$
$R_2$	$R_{fuite}$	$R_{fuite} + (\rho_{coeur} + \rho_{coquille}) (y_0 - y_d)$	$R_{fuite} - \rho_{coquille} y_d + \rho_{coeur} (y_0 - y_d)$
$R_3$	$(\rho_{coeur} + \rho_{coquille}) (y_d - y_0)$	0	$\rho_{coquille} y_0$

Les profils EBIC sont donc donnés par (cf. Eq. 155):

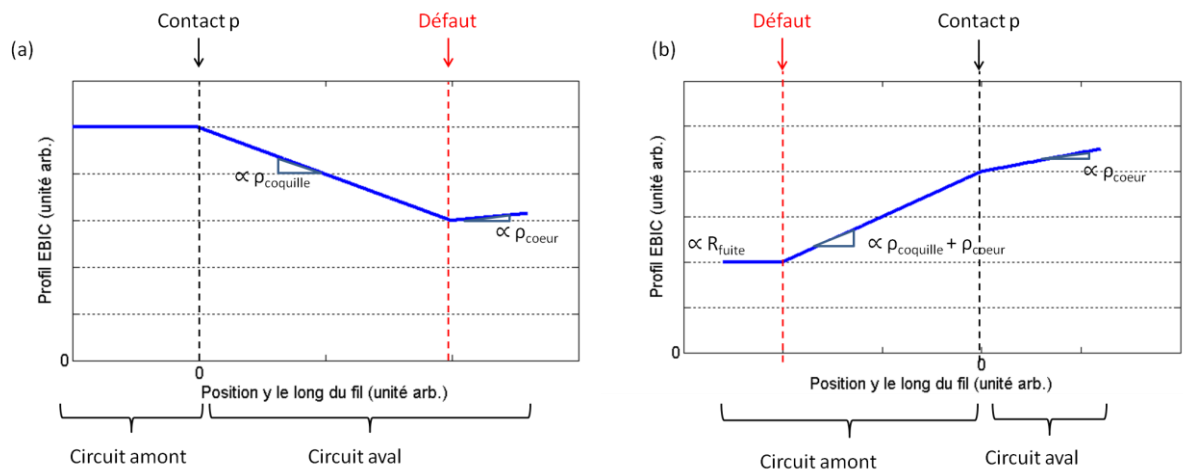
$$I_{EBIC}(y_0) = \begin{cases} -I_{illum} R_{II}^{-1} R_{fuite} & \text{pour } -L_{sup} \leq y_0 \leq y_d \\ -I_{illum} R_{II}^{-1} (R_{fuite} + (\rho_{coquille} + \rho_{coeur})(y_0 - y_d)) & \text{pour } y_d \leq y_0 \leq 0 \\ -I_{illum} R_{II}^{-1} (R_{fuite} - \rho_{coquille} y_d + \rho_{coeur}(y_0 - y_d)) & \text{pour } 0 \leq y_0 \leq L_{inf} \end{cases}$$

**Eq. 162**

où  $R_{II} = R_{fuite} - (\rho_{coquille} + \rho_{coeur}) y_d + \rho_{coeur} L_{inf}$ . On peut faire les remarques suivantes :

- Le signal EBIC est constant entre le sommet du fil et le défaut. Dans la limite d'une fuite de résistance nulle, aucun courant généré dans cette région n'est collecté.
- Le profil EBIC varie linéairement de part et d'autre du contact p. En valeur absolue, le courant EBIC croît lorsque la distance entre la région excitée et le défaut augmente. Le maximum de l'efficacité de transport est donc localisée à la fin de l'hétérostructure, i.e. le plus loin du contact p dans le circuit aval.
- Le coefficient directeur du profil dans la partie inférieure du fil est proportionnel à la résistivité du cœur  $\rho_{coeur}$ . Dans le cas limite où la résistance du cœur est nulle, le profil EBIC est donc plat dans cette région.
- Le coefficient directeur du profil entre le défaut et le contact est proportionnel à la somme des résistivités du cœur et de la coquille  $(\rho_{coquille} + \rho_{coeur})$ .

La Figure 82 résume les résultats obtenus en présentant l'allure des profils EBIC que l'on attend en présence d'une fuite ponctuelle localisée dans le circuit amont ou aval, dans l'hypothèse où la redistribution par cette fuite est le mécanisme dominant.



**Figure 82** Allure général du profil EBIC attendu en présence d'un défaut ponctuel dans le circuit aval (a) ou amont (b)

# Annexe II-E

## - Méthode expérimentale pour déterminer les profils de résistivité du cœur et de la coquille d'un nanofil -

---

Comme nous venons de le voir dans l'annexe précédente, les profils EBIC en présence d'un défaut contiennent des informations concernant à la fois le défaut ( $R_{fuite}$ ) et les résistivités du cœur et de la coquille. Hors ces dernières sont une information qu'il est difficile d'obtenir expérimentalement: au mieux, on peut avoir une valeur moyenne à l'aide de mesures électriques utilisant deux ou quatre contacts. Pourtant cette information est cruciale : elle permet par exemple de savoir si le dopage est homogène le long de la coquille et donc d'en déduire si l'injection de courant en fonctionnement de type LED sera optimale. L'objet de ce paragraphe propose une méthode pour déterminer expérimentalement non seulement la valeur moyenne des résistivités du cœur et de la coquille mais aussi leur profil tout le long de l'axe du fil. De plus, la méthode permet de déterminer le profil de l'efficacité de collecte de la jonction qui peut apporter des informations concernant la qualité cristalline du matériau, l'efficacité de capture par les puits quantiques etc.

Pour cela, le fil doit posséder au moins deux contacts  $p$  sur son hétérostructure. On appelle contact n°1 situé en  $y_1$  le contact le plus proche du sommet du fil et contact n°2 en  $y_2$  celui le plus proche du contact n. L'origine de l'axe  $y$  est choisie au niveau du contact n°1 et on note  $L$  la distance entre les deux contacts  $L = y_2 - y_1$ . L'idée est d'utiliser l'un des contacts afin de collecter le signal EBIC et l'autre pour créer artificiellement un défaut en le connectant à un potentiel adéquat. Pour que la méthode soit applicable, il est nécessaire de supposer que les fuites dans la jonction sont négligeables (diode idéale) : la seule fuite pertinente dans le système est celle créée artificiellement par le contact. Comme les résultats présentés dans la section 2.3 l'ont suggéré, la résistivité de la coquille (mais aussi éventuellement celle du cœur) peut varier spatialement le long de l'axe du fil. De même, l'efficacité de collecte  $\Sigma$  de la jonction n'est pas nécessairement constante le long du fil. Le protocole proposé pour les mesurer est le suivant :

- 1) Il faut d'abord chercher des conditions dans lesquelles l'efficacité de transport est égale à 1 entre les deux contacts  $p$ , ce qui signifie travailler avec un courant généré suffisamment faible et une tension appliquée pas trop élevée. Pour vérifier que cette condition est obtenue, il suffit d'acquérir par exemple une cartographie EBIC en utilisant l'un puis l'autre contact  $p$ . Le contact  $p$  qui n'est pas utilisé est laissé à un potentiel flottant. Si l'efficacité de transport est égale à 1 dans les deux cas, les profils sont identiques. De plus, en valeur absolue, ces profils sont rigoureusement égaux au profil du courant d'illumination  $I_{illum}(y_0)$  lui-même proportionnel à l'efficacité de collecte de la jonction.
- 2) On place ensuite le contact n°2 à un potentiel fixé et on acquiert le signal EBIC à partir du courant traversant le contact n°1. On pourrait être tenté de placer le contact n°2 à la masse, qui correspond à peu près au potentiel du cœur si ce dernier n'est pas trop résistif : cette situation serait alors analogue à la présence d'une résistance de fuite de faible valeur reliant la coquille et le cœur. Cependant, ce choix n'est pas toujours le plus pertinent, notamment lorsque la tension appliquée sur le contact n°1 n'est pas nulle. Cela peut en effet induire un fort courant le long de la coquille dopée  $p$  susceptible de provoquer un échauffement voire d'endommager la structure. De plus, pour que cela fonctionne, il serait nécessaire que même



à 0 V la redistribution du courant dans la jonction soit négligeable, ce qui n'est pas toujours le cas comme nous l'avons vu dans la section 2.3. Nous avons démontré précédemment que le signal EBIC ne dépend pas de la tension appliquée pour un système avec un seul contact p et un défaut ponctuel. La démonstration est strictement identique pour un système à deux contacts. Par conséquent, quelque soit le potentiel appliqué sur le contact n°2, le courant EBIC qui fuit à travers ce contact est inchangé : le profil EBIC mesuré avec le contact n°1 est donc indépendant du potentiel sur le contact n°2. En conclusion, il est donc préférable d'appliquer le même potentiel sur les deux contacts pour éviter le problème d'échauffement. En pratique, le potentiel est appliqué par l'intermédiaire de l'amplificateur de courant (voir Figure 48). Pour éviter d'utiliser une source de tension additionnelle et ne mesurer que le courant issu du contact n°1, on peut placer entre l'amplificateur de courant et le contact n°2 un montage de type suiveur à l'aide d'un amplificateur opérationnel. Le montage est illustré sur la Figure 83. Si l'on suppose pour simplifier que les deux contacts p sont situés aux extrémités de l'hétérostructure, le profil que l'on mesure dans cette configuration est donné en généralisant l'équation Eq. 161 par :

$$I_{EBIC-2}(y_0) = -I_{illum}(y_0) R_I^{-1} \left( R_{contact\ 2} + \int_{y_0}^{y_2} \rho_{coquille}(y) dy \right)$$

**Eq. 163**

où  $I_{illum}$  est le profil mesuré à l'étape précédente. On note par ailleurs  $R_I = R_{contact1} + R_{contact\ 2} + \langle \rho_{coquille} \rangle L$  avec  $R_{contact1}$  et  $R_{contact\ 2}$  correspondant aux résistances d'accès des contacts 1 et 2 respectivement ;  $\langle \rho_{coquille} \rangle$  est la valeur moyenne de la résistivité de la coquille entre les deux contacts. On peut donc en déduire le profil de résistivité de la coquille :

$$\rho_{coquille}(y_0) = R_I \frac{d}{dy_0} \left( \frac{I_{EBIC-2}}{I_{illum}} \right)$$

**Eq. 164**

où  $I_{illum}$  est le profil EBIC mesuré à l'étape 1. On constate que pour entièrement déterminer la valeur exacte de la résistivité de la coquille, la grandeur  $R_I$  doit avoir été mesurée par un autre moyen, à partir d'une courbe I-V entre les deux contacts p par exemple.  $R_I$  dépend en partie des résistances des contacts. On a intérêt à ce que cette résistance soit la plus faible possible pour que les variations  $\frac{d}{dy_0} \left( \frac{I_{EBIC-2}}{I_{illum}} \right)$  soit les plus marquées. Lorsque le contact est de type légèrement Schottky, il est donc préférable de mesurer les profils pour une tension appliquée  $U \leq 0$ . De cette façon,  $R_{contact\ 1,2}$  diminue. De plus le rapport signal/bruit s'améliore.

- 3) On répète ensuite la mesure en échangeant les contacts 1 et 2. Le profil obtenu s'exprime alors en généralisant l'équation Eq. 162 :

$$I_{EBIC-3}(y_0) = -I_{illum}(y_0) R_{II}^{-1} \left( R_{contact\ 1} + \int_{y_0}^L (\rho_{coquille}(y) + \rho_{coeur}(y)) dy \right)$$

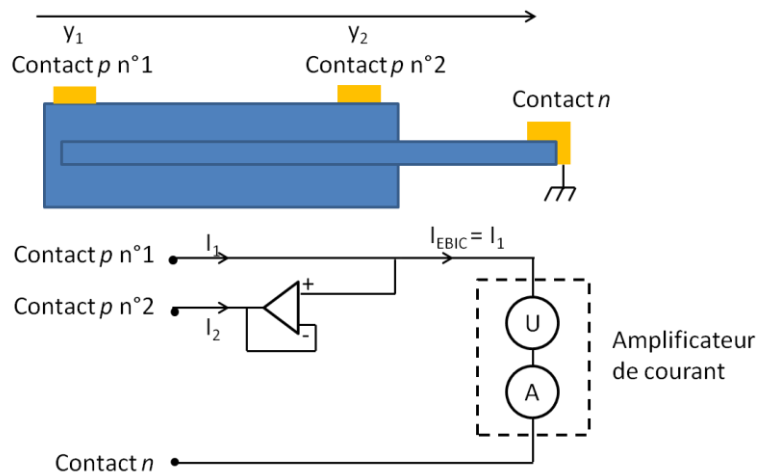
**Eq. 165**

où  $R_{II} = R_{contact\ 1} + R_{contact\ 2} + < (\rho_{coquille} + \rho_{coeur}) > L$ . On peut donc en déduire le profil de la résistance du  $\rho_{coeur}(y)$  :

$$\rho_{coeur}(y_0) = R_{II} \frac{d}{dy_0} \left( \frac{I_{EBIC-3}}{I_{illum}} \right) - \rho_{coquille}(y_0)$$

**Eq. 166**

On a donc montré que l'on pouvait extraire à partir des mesures EBIC les profils de résistivité du cœur et de la coquille. La difficulté majeure de la méthode proposée est liée à l'opération de dérivation qui génère beaucoup de bruit. Si l'on utilise le montage indiquée dans la Figure 83, il faut également veiller à ce que le bruit introduit par l'amplificateur opérationnel (AO) reste faible. Les meilleurs amplificateurs opérationnels à très faible courant d'entrée ont actuellement des courants d'entrée inférieurs à 25 fA (modèle LMC6001 par exemple). Le montage avec AO pourrait donc permettre de mesurer avec une erreur négligeable des courants EBIC au dessus de 0.25 nA.



**Figure 83 Montage permettant d'appliquer le même potentiel sur les deux contacts tout en ne mesurant que le courant issu du contact n°1.**

# Annexe II-F

## - Collecte de la jonction en présence de recombinaison de surface -

### Cas limite du volume de génération infini

Dans la section 2.2.2.1, nous avons montré que dans l'approximation où la génération de paires électron-trou est homogène ( $g(r, z) = g$ ), la jonction p-n se comporte comme si elle ne collectait que les paires générées à une distance  $L$  du bord de la ZCE où  $L$  représente la longueur de diffusion des porteurs minoritaires. Dans cette annexe, nous reprenons ce cas en considérant en plus la recombinaison de surface. Le système que l'on étudie est constitué d'une jonction p-n planaire et la surface dont on étudie l'influence est située du côté dopé p et est parallèle à la jonction. On note alors  $d_{ZCE}$  la distance entre la surface et le bord de la ZCE. L'équation de transports des porteurs minoritaires générés (*i.e.* les électrons) s'écrit en toute généralité :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = g - r + \frac{1}{q} \nabla \cdot \mathbf{J}$$

Eq. 167

$n$  est la concentration d'électron,  $g$  et  $r$  sont les taux de génération et de recombinaison et  $\mathbf{J}$  est la densité de courant d'électrons. Dans le cas présent, on se place en régime stationnaire. On suppose également que le champ électrique en dehors de la ZCE est nul : seul le courant de diffusion est donc à prendre en compte, *i.e.*  $\mathbf{J} = q D \nabla n$  où  $D$  est le coefficient de diffusion des électrons et  $q$  est la charge élémentaire. De plus, on suppose que l'on est en régime de faible injection. On peut alors écrire  $r = n/\tau$  où  $\tau$  est le temps de vie des électrons. L'équation Eq. 167 devient donc :

$$\frac{\partial^2 n}{\partial z^2} - \frac{n}{L^2} = -\frac{g}{D}$$

Eq. 168

où  $L^2 = D\tau$ . L'origine de l'axe  $z$  est choisie au niveau de la surface. La solution que l'on cherche est la somme d'une solution particulière, par exemple  $n_{part}(z) = g\tau$ , et d'une solution homogène  $n_{hom}(z) = A e^{-\frac{z}{L}} + B e^{\frac{z}{L}}$  où  $A$  et  $B$  sont deux constantes qui dépendent des conditions aux limites. Pour simplifier, on suppose que la vitesse de recombinaison à la surface est infinie et que la jonction p-n collecte immédiatement les porteurs minoritaires qui diffusent jusqu'à ses bords. Ainsi, les conditions aux limites s'écrivent :

$$n(z = 0) = n(z = d_{ZCE}) = 0,$$

Eq. 169

ce qui conduit à la solution suivante :

$$n(z) = g \tau \left( 1 - \frac{ch\left(\frac{z - d_{ZCE}/2}{L}\right)}{ch\left(\frac{d_{ZCE}}{2L}\right)} \right)$$

Eq. 170

$ch$  est la fonction cosinus hyperbolique. On remarquera que la surface a pour effet de diminuer la concentration de porteurs de charge minoritaire : la concentration maximale vaut  $g \tau \left( 1 - \frac{1}{ch\left(\frac{d_{ZCE}}{2L}\right)} \right)$  contre  $g \tau$  en l'absence de la surface.

Par ailleurs, le courant collecté par la jonction est égal au courant de diffusion en  $z = d_{ZCE}$ , *i.e.*  $J(z = d_{ZCE}) = qD \frac{\partial n}{\partial z}(z = d_{ZCE})$ , ce qui donne :

$$J(z = d_{ZCE}) = q g L th\left(\frac{d_{ZCE}}{2L}\right)$$

Eq. 171

On remarque donc que la jonction se comporte comme si elle ne collectait que les paires électrons-trous situées à une distance  $L th\left(\frac{d_{ZCE}}{2L}\right)$  du bord de la ZCE. On vérifie que cette grandeur tend vers  $L$  lorsque la distance  $d_{ZCE}$  tend vers  $+\infty$ , ce qui correspond au cas étudié dans la section 2.2.2.1. Dans le cas limite où la distance entre la surface et le bord de la jonction devient petite devant la longueur de diffusion des porteurs minoritaires, on remarque que  $L th\left(\frac{d_{ZCE}}{2L}\right)$  est équivalent à  $\frac{d_{ZCE}}{2}$  : cela indique que les paires générées sont pour moitié collecté par la jonction et pour moitié se recombine à la surface. Dans ce cas limite, la zone de collecte de la jonction ne dépend donc plus de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires.

## Cas limite du volume de génération ponctuel

Dans le paragraphe précédent, nous avons traité du cas limite où l'on suppose que le volume de génération est infini, *i.e.* grand devant soit la longueur de diffusion des porteurs minoritaires, soit l'épaisseur de la couche dopé p. Nous allons traiter dans ce paragraphe du cas limite inverse où l'on suppose que le volume de génération est ponctuel. Cette approche est notamment utile lorsque l'on étudie les profils EBIC de nanofils clivés : les profils EBIC peuvent être utilisés pour déduire les longueurs de diffusion des porteurs minoritaires. Nous allons étudier dans quelle mesure cette approche est valable lorsque l'on prend en compte la recombinaison de surface. Dans ce paragraphe, l'orientation de l'axe  $z$  est choisie pour des raisons pratiques à l'opposé du paragraphe précédent : l'origine de l'axe  $z$  correspond au bord de la jonction p-n tandis que la position  $z = d_{ZCE}$  correspond à la surface.

L'approche utilisée très couramment dans la littérature consiste tout d'abord à simplifier le problème pour se ramener à un cas unidimensionnel : on suppose que la génération est ponctuelle le long de l'axe  $z$ , *i.e.* l'axe perpendiculaire au plan de la jonction p-n, mais est en revanche délocalisé dans le plan parallèle à la jonction p-n. Dans ce cas, l'équation de transport s'écrit de façon analogue à l'équation Eq. 168 :

$$\frac{\partial^2 n}{\partial z^2} - \frac{n}{L^2} = -\frac{G}{D} \delta(z - z_0)$$

**Eq. 172**

où  $G$  est le taux de génération,  $\delta$  est la fonction de Dirac et  $z_0$  est la position excitée en EBIC. On remarquera que cette équation est identique à l'équation Eq. 147 résolue dans l'annexe C. Par identification, on en déduit la solution :

$$n(z) = \begin{cases} z < z_0, & A e^{-\frac{z}{L}} + B e^{\frac{z}{L}} + \frac{GL}{2D} e^{\frac{z-z_0}{L}} \\ z > z_0, & A e^{-\frac{z}{L}} + B e^{\frac{z}{L}} + \frac{GL}{2D} e^{-\frac{(z-z_0)}{L}} \end{cases}$$

**Eq. 173**

où  $A$  et  $B$  sont des constantes déterminées par les conditions aux limites. Dans notre cas, si l'on suppose que la vitesse de recombinaison de surface est infinie et que la jonction collecte instantanément tout porteur minoritaire diffusant jusqu'au bord de la ZCE, les conditions s'écrivent comme dans le paragraphe précédent, à savoir  $n(z = 0) = n(z = d_{ZCE}) = 0$ . Après calcul, on obtient alors pour  $A$  et  $B$  :

$$\begin{cases} A = -\frac{GL}{2D} \frac{sh\left(\frac{d_{ZCE} - z_0}{L}\right)}{sh\left(\frac{d_{ZCE}}{L}\right)} \\ B = -\frac{GL}{2D} \frac{sh\left(\frac{z_0}{L}\right)}{sh\left(\frac{d_{ZCE}}{L}\right)} e^{-\frac{z_0}{L}} \end{cases}$$

**Eq. 174**

où  $sh$  représente la fonction sinus hyperbolique. On peut alors en déduire le courant collecté par la jonction donné par l'équation  $J = qD \frac{\partial n}{\partial z}$ . Cela donne après calcul :

$$J_{EBIC}(z_0) = \frac{qG}{2} \left[ \frac{sh\left(\frac{d_{ZCE} - z_0}{L}\right) - sh\left(\frac{z_0}{L}\right) e^{-\frac{d_{ZCE}}{L}}}{sh\left(\frac{d_{ZCE}}{L}\right)} + e^{-\frac{z_0}{L}} \right]$$

**Eq. 175**

Quand  $d_{ZCE}$  tend vers  $+\infty$ , *i.e.* quand la distance entre le bord de la jonction et la surface devient grande devant la longueur de diffusion des porteurs minoritaires  $L$ , on remarque que le terme  $\frac{sh\left(\frac{d_{ZCE} - z_0}{L}\right) - sh\left(\frac{z_0}{L}\right) e^{-\frac{d_{ZCE}}{L}}}{sh\left(\frac{d_{ZCE}}{L}\right)}$  devient équivalent à  $e^{-\frac{z_0}{L}}$ . On retrouve donc la formule « standard » utilisée dans la littérature, à savoir une décroissance exponentielle avec une distance caractéristique de décroissance égale à la longueur de diffusion des porteurs minoritaires:

$$J_{EBIC}(z_0) \xrightarrow{d_{ZCE} \rightarrow +\infty} qG e^{-\frac{z_0}{L}}$$

**Eq. 176**

A l'inverse, lorsque  $d_{ZCE}$  est comparable voire plus petit que la longueur de diffusion des porteurs minoritaire, le profil devient plus complexe. Un développement limité au premier ordre aboutit à l'équation suivante :

$$J_{EBIC}(z_0) \sim_{d_{ZCE} \rightarrow 0} \frac{qG}{2} \left[ 1 - \frac{z_0}{(d_{ZCE}/2)} - \frac{z_0}{L} + o\left(\frac{z_0}{L}\right) \right]$$

**Eq. 177**

On voit alors que la longueur caractéristique de décroissance n'est plus exactement  $L$  mais est plutôt remplacée par  $L_{eq}$  où :

$$\frac{1}{L_{eq}} = \frac{1}{d_{ZCE}} + \frac{1}{2L}$$

**Eq. 178**

On remarque que  $L_{eq}$  tend vers  $d_{ZCE}$  à mesure que  $d_{ZCE}/L$  tend vers 0 : le profil EBIC ne dépend alors plus de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires.

# Conclusion générale

---

Dans ce travail de thèse, j'ai étudié à la fois expérimentalement et théoriquement les propriétés optoélectroniques de nanofils de nitrures d'éléments III. Dans une première partie, je me suis intéressé à l'interprétation des caractéristiques courant-tension de dispositifs à nanofil unique. J'ai utilisé pour cette étude des nanofils possédant une hétérostructure à segment large InGaN/GaN. À l'aide d'un modèle simple que j'ai développé, j'ai pu montrer que le courant de fuite en inverse était dominé par le transport tunnel des électrons de la bande de valence vers la bande de conduction. Le transport des porteurs de charge est assisté par les phonons et se fait à travers la bande interdite du GaN par l'intermédiaire d'états localisés liés aux défauts. La prise en compte de l'assistance des phonons dans le transport tunnel permet d'expliquer la dépendance en température observée expérimentale. J'ai également cherché à identifier les mécanismes de conduction dominants lorsque l'on polarise la jonction en direct. Les résultats obtenus suggèrent que la conduction est dominée par le transport tunnel par l'intermédiaire des défauts à faible tension. L'apparition d'un autre mécanisme de conduction en dessous de 60 K pour des tensions inférieures à 1.5 V a été mise en évidence. La nature exacte de ce mécanisme n'est cependant pas clairement identifiée. Il pourrait éventuellement s'agir de recombinaison de type Shockley-Read-Hall. Lorsque la tension est polarisée à plus de 3 V, le mécanisme dominant est la recombinaison radiative dans l'InGaN. La domination progressive de ce mécanisme pourrait expliquer la rupture de pente observée dans les caractéristiques courant-tension. Cette rupture est particulièrement visible lorsque l'on observe la fonction  $d(\log(I))/dU$  : elle se traduit par la présence d'une marche sur la courbe. L'analyse des courbes  $d(\log(I))/dU$  met par ailleurs en évidence le phénomène de concentration du courant à proximité du contact, dû à la résistance de la coquille. Ce phénomène a été confirmé par des mesures EBIC. De plus, en calculant les caractéristiques courant-tension de nanofils que j'ai modélisés par un circuit équivalent, j'ai montré qu'à forte tension la chute de potentiel dans la coquille au niveau du contact peut également provoquer une rupture de pente dans les caractéristiques courant-tension. Cela fournit une deuxième hypothèse permettant d'interpréter les courbes  $(\log(I))/dU$ . Une solution qui permettrait d'infirmer l'une des hypothèses consisterait à comparer les courbes courant-tension obtenues avec un nouvel échantillon identique en tout point à celui que nous venons d'étudier, hormis concernant l'épaisseur de la coquille : une coquille plus épaisse devrait induire un décalage de la rupture de pente vers les plus basses tensions, la résistance en série étant plus importante dans ce cas.

Je me suis également intéressé aux propriétés d'électroluminescence des nanofils. L'étude que j'ai présentée a été réalisée à l'aide de nanofils possédant une hétérostructure à puits quantiques. Ces nanofils présentent la particularité de posséder une hétérostructure à la fois sur leurs facettes radiales et axiale. L'étude de l'électroluminescence en fonction du courant d'injection et de la température a révélé la présence de deux contributions spectrales. À l'aide de la cartographie de cathodoluminescence, ces contributions ont été identifiées comme provenant de l'hétérostructure InGaN/GaN axiale et de l'hétérostructure radiale. Le fonctionnement de LEDs à nanofils uniques a été modélisé à l'aide d'un schéma électrique équivalent permettant de décrire les effets observés expérimentalement. L'étude de cathodoluminescence avait par ailleurs révélé la présence d'un gradient de composition des puits quantiques radiaux le long de l'axe des nanofils. Une autre hypothèse envisagée pour expliquer les observations expérimentales repose sur la diffusion et la

dérive des porteurs au sein des puits quantiques. Cependant, j'ai infirmé cette hypothèse en calculant analytiquement la densité de porteurs au sein des puits en prenant en compte le champ électrique effectif

Dans le deuxième chapitre, je me suis intéressé à la caractérisation de nanofil cœur-coquille à l'aide de la technique de courant induit par faisceau d'électrons (EBIC). Cette technique n'avait auparavant jamais été utilisée pour caractériser des nanofils à hétérostructure cœur-coquille. J'ai réalisé une étude aussi bien expérimentale que théorique sur ce sujet. Le modèle que j'ai développé permet de reproduire qualitativement les tendances observées. Ils montrent que les cartographies EBIC réalisées sur des nanofils cœur-coquille dépendent à la fois des variations spatiales de l'efficacité de collecte des porteurs de charges minoritaires et de l'efficacité de transport des porteurs de charge majoritaires le long du cœur et de la coquille jusqu'aux contacts.

Ces premiers résultats s'inscrivent dans un domaine de recherche qui pourrait contribuer à l'amélioration de la réalisation de LEDs à base d'ensembles de nanofils cœur-coquille InGaN/GaN. L'EBIC, comme je l'ai illustré dans le deuxième chapitre, permet de mettre en évidence des inhomogénéités des propriétés structurales dans les nanofils à structure cœur-coquille. Cette technique peut donc s'avérer avantageuse pour comprendre l'origine des variabilités des propriétés électriques entre nanofils, ces nanofils pouvant sembler structurellement identiques. Comme je l'illustre dans l'annexe II-D, l'utilisation de l'EBIC sur les nanofils cœur-coquille ouvre également la voie à de nouvelle méthode de caractérisation : je montre par exemple que cette technique peut être utilisée pour cartographier les résistivités du cœur et de la coquille des nanofils.



# Bibliographie

---

- [1] R. S. Wagner and W. C. Ellis, "The vapor-Liquid-Solid Mechanism of Crystal Growth and," *Trans. Metall. Soc. Aime*, vol. 233, no. June, pp. 1053–1064, 1965.
- [2] K. Haraguchi, T. Katsuyama, and K. Hiruma, "Polarization dependence of light emitted from GaAs p-n junctions in quantum wire crystals," *J. Appl. Phys.*, vol. 75, no. 8, p. 4220, 1994.
- [3] M. Law, J. Goldberger, and P. Yang, "Semiconductor Nanowires and Nanotubes," *Annu. Rev. Mater. Res.*, vol. 34, no. 1, pp. 83–122, Aug. 2004.
- [4] L. J. Lauhon, M. S. Gudiksen, and C. M. Lieber, "Semiconductor nanowire heterostructures," *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, vol. 362, no. 1819, pp. 1247–60, Jun. 2004.
- [5] P. Yang, R. Yan, and M. Fardy, "Semiconductor nanowire: what's next?," *Nano Lett.*, vol. 10, no. 5, pp. 1529–36, May 2010.
- [6] Y. Li, F. Qian, J. Xiang, and C. M. Lieber, "Nanowire electronic and optoelectronic devices," *Mater. Today*, vol. 9, no. 10, pp. 18–27, 2006.
- [7] P. Ramvall, S. Tanaka, S. Nomura, P. Riblet, and Y. Aoyagi, "Observation of confinement-dependent exciton binding energy of GaN quantum dots," *Applied Physics Letters*, vol. 73, no. 8, p. 1104, 1998.
- [8] H. E. Ruda and A. Shik, "Polarization-sensitive optical phenomena in thick semiconducting nanowires," *J. Appl. Phys.*, vol. 100, no. 2, p. 024314, 2006.
- [9] J. a Garrido, E. Monroy, I. Izpura, and E. Muñoz, "Photoconductive gain modelling of GaN photodetectors," *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 13, no. 6, pp. 563–568, Jun. 1998.
- [10] Q. Li, Y. Lin, J. R. Creighton, J. J. Figiel, and G. T. Wang, "Nanowire-Templated Lateral Epitaxial Growth of Low-Dislocation Density Nonpolar a -Plane GaN on r -Plane Sapphire," *Adv. Mater.*, vol. 21, no. 23, pp. 2416–2420, Jun. 2009.
- [11] F. Glas, "Critical dimensions for the plastic relaxation of strained axial heterostructures in free-standing nanowires," *Phys. Rev. B*, vol. 74, no. 12, pp. 2–5, Sep. 2006.
- [12] K. Kishino, H. Sekiguchi, and A. Kikuchi, "Improved Ti-mask selective-area growth (SAG) by rf-plasma-assisted molecular beam epitaxy demonstrating extremely uniform GaN nanocolumn arrays," *J. Cryst. Growth*, vol. 311, no. 7, pp. 2063–2068, Mar. 2009.
- [13] O. Ambacher, J. Majewski, J. Miskys, A. Link, M. Hermann, M. Eickhoff, M. Stutzmann, F. Bernardini, V. Fiorentini, V. Tilak, B. Schaff, and L. F. Eastman, "Pyroelectric properties of Al(In)Ga<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> hetero- and quantum well structures," *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 14, pp. 3399–3434, 2002.
- [14] J. Iveland, L. Martinelli, J. Peretti, J. S. Speck, and C. Weisbuch, "Direct Measurement of Auger Electrons Emitted from a Semiconductor Light-Emitting Diode under Electrical Injection:

- Identification of the Dominant Mechanism for Efficiency Droop," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, no. 17, p. 177406, Apr. 2013.
- [15] R. Yan, D. Gargas, and P. Yang, "Nanowire photonics," *Nat. Photonics*, vol. 3, no. 10, pp. 569–576, 2009.
  - [16] F. Qian, S. Gradecak, Y. Li, C.-Y. Wen, and C. M. Lieber, "Core/multishell nanowire heterostructures as multicolor, high-efficiency light-emitting diodes.," *Nano Lett.*, vol. 5, no. 11, pp. 2287–91, Nov. 2005.
  - [17] S. Gradečak, F. Qian, Y. Li, H.-G. Park, and C. M. Lieber, "GaN nanowire lasers with low lasing thresholds," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 87, no. 17, p. 173111, 2005.
  - [18] W. Shockley, "The theory of p-n junctions in semiconductors and p-n junction transistors," *Bell Syst. Tech. J.*, vol. 28, no. 3, pp. 435–489, 1949.
  - [19] R. A. Smith, *Semiconductors*. Cambridge University Press, 1961, pp. 240–246.
  - [20] O. Svensk, P. T. Törmä, S. Suihkonen, M. Ali, H. Lipsanen, M. Sopanen, M. a. Odnoblyudov, and V. E. Bougrov, "Enhanced electroluminescence in 405 nm InGaN/GaN LEDs by optimized electron blocking layer," *J. Cryst. Growth*, vol. 310, pp. 5154–5157, 2008.
  - [21] X. Ni, X. Li, J. Lee, S. Liu, V. Avrutin, Ü. Özgür, H. Morkoç, a. Matulionis, T. Paskova, G. Mulholland, and K. R. Evans, "InGaN staircase electron injector for reduction of electron overflow in InGaN light emitting diodes," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 97, pp. 3–5, 2010.
  - [22] E. Kioupakis, P. Rinke, K. T. Delaney, and C. G. Van de Walle, "Indirect Auger recombination as a cause of efficiency droop in nitride light-emitting diodes," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 98, no. 16, p. 161107, 2011.
  - [23] E. Rosencher and V. Borge, *Optoélectronique*, Dunod. .
  - [24] P. Rinke, M. Scheffler, a. Qteish, M. Winkelnkemper, D. Bimberg, and J. Neugebauer, "Band gap and band parameters of InN and GaN from quasiparticle energy calculations based on exact-exchange density-functional theory," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 89, no. May 2015, pp. 12–15, 2006.
  - [25] C.-T. Sah, R. N. Noyce, and W. Shockley, "Carrier generation and Recombination in P-N Junctions and P-N Junction Characteristics," in *PROCEEDINGS OF THE IRE*, 1956, vol. 1, pp. 1228–1244.
  - [26] Ioffe, "Database of semiconductors properties." [Online]. Available: <http://www.ioffe.rssi.ru/SVA/NSM/Semicond/>. [Accessed: 01-Jan-2015].
  - [27] V. Y. Davydov, A. A. Klochikhin, and V. V Emtsev, "Rapid Research Note Band Gap of InN and In-Rich In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N alloys ( 0 . 36 < x < 1 )," *Physics (College. Park. Md.)*, vol. 6, no. 2, pp. 6–8, 2002.
  - [28] a. D. L. Bugallo, L. Rigutti, G. Jacopin, F. H. Julien, C. Durand, X. J. Chen, D. Salomon, J. Eymery, and M. Tchernycheva, "Single-wire photodetectors based on InGaN/GaN radial quantum wells

- in GaN wires grown by catalyst-free metal-organic vapor phase epitaxy," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 98, no. 23, p. 233107, 2011.
- [29] a. G. Chynoweth, W. L. Feldmann, and R. a. Logan, "Excess tunnel current in silicon Esaki junctions," *Phys. Rev.*, vol. 121, no. 1958, pp. 684–694, 1961.
  - [30] D. J. Dumin and G. L. Pearson, "Properties of Gallium Arsenide Diodes between 4.2° and 300°K," *J. Appl. Phys.*, vol. 36, no. 1965, p. 3418, 1965.
  - [31] P. G. Eliseev, P. Perlin, J. Furioli, P. Sartori, J. Mu, and M. Osiński, "Tunneling current and electroluminescence in InGaN: Zn,Si/AlGaIn/GaN blue light emitting diodes," *J. Electron. Mater.*, vol. 26, no. 3, pp. 311–319, 1997.
  - [32] A. R. Riben and D. L. Feucht, "nGe-pGaAs HETEROJUNCTION," *Solid. State. Electron.*, vol. 9, no. 3, pp. 1055–1065, 1966.
  - [33] M. S. Kumar, S. J. Chung, H. W. Shim, C.-H. Hong, E.-K. Suh, and H. J. Lee, "Anomalous current–voltage characteristics of InGaIn/GaN light-emitting diodes depending on Mg flow rate during p-GaN growth," *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 19, pp. 725–727, 2004.
  - [34] V. L. Rideout and C. R. Crowell, "Effects of image force and tunneling on current transport in metal-semiconductor (Schottky barrier) contacts," *Solid. State. Electron.*, vol. 13, pp. 993–1009, 1970.
  - [35] J. M. Shah, Y. L. Li, T. Gessmann, and E. F. Schubert, "Experimental analysis and theoretical model for anomalous high ideality factors ( $n \gg 2.0$ ) in AlGaIn/GaN p-n junction diodes," *J. Appl. Phys.*, vol. 94, no. 4, pp. 2627–2630, 2003.
  - [36] R. Koester, J.-S. Hwang, D. Salomon, X. Chen, C. Bougerol, J.-P. Barnes, D. L. S. Dang, L. Rigutti, A. de Luna Bugallo, G. Jacopin, M. Tchernycheva, C. Durand, and J. Eymery, "M-plane core-shell InGaIn/GaN multiple-quantum-wells on GaN wires for electroluminescent devices," *Nano Lett.*, vol. 11, no. 11, pp. 4839–45, Nov. 2011.
  - [37] X. J. Chen, G. Perillat-Merceroz, D. Sam-Giao, C. Durand, and J. Eymery, "Homoepitaxial growth of catalyst-free GaN wires on N-polar substrates," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 97, no. 15, p. 151909, 2010.
  - [38] R. Koester, J. S. Hwang, C. Durand, D. L. S. Dang, and J. Eymery, "Self-assembled growth of catalyst-free GaN wires by metal-organic vapour phase epitaxy," *Nanotechnology*, vol. 21, no. 1, p. 015602, Jan. 2010.
  - [39] P. Tchoufian, F. Donatini, F. Levy, B. Amstatt, P. Ferret, and J. Pernot, "High conductivity in Si-doped GaN wires," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 102, no. 12, p. 122116, 2013.
  - [40] S. Keller, "Growth of bulk InGaIn films and quantum wells by atmospheric pressure metalorganic chemical vapour deposition," *J. Cryst. Growth*, vol. 170, no. 1–4, pp. 349–352, Jan. 1997.
  - [41] S. Nakamura, N. Iwasa, M. Senoh, and M. Takashi, "Hole compensation mechanism of P-type GaN Films," *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 31, pp. 1258–1266, 1992.

- [42] S. Nakamura, T. Mukai, M. Senoh, and I. Naruhito, "Thermal annealing effects on p-type Mg-doped GaN Films," *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 31, pp. L139–L142, 1992.
- [43] [Http://www.nextnano.de/](http://www.nextnano.de/), "Nextnano software." [Online]. Available: <http://www.nextnano.de/>.
- [44] I. Vurgaftman and J. R. Meyer, "Band parameters for nitrogen-containing semiconductors," *J. Appl. Phys.*, vol. 94, no. 6, p. 3675, 2003.
- [45] P. G. Moses and C. G. Van de Walle, "Band bowing and band alignment in InGaN alloys," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 96, no. 2, p. 021908, 2010.
- [46] Z. Deng, Y. Jiang, W. Wang, L. Cheng, W. Li, W. Lu, H. Jia, W. Liu, J. Zhou, and H. Chen, "Indium segregation measured in InGaN quantum well layer," *Sci. Rep.*, vol. 4, no. 0002, p. 6734, 2014.
- [47] E. Poliani, M. R. Wagner, J. S. Reparaz, M. Mandl, M. Strassburg, X. Kong, A. Trampert, C. M. Sotomayor Torres, A. Hoffmann, and J. Maultzsch, "Nanoscale Imaging of InN Segregation and Polymorphism in Single Vertically Aligned InGaN/GaN Multi Quantum Well Nanorods by Tip-Enhanced Raman Scattering," *Nano Lett.*, no. 13, pp. 3205–3212, Jun. 2013.
- [48] N. Duxbury, U. Bangert, P. Dawson, E. J. Thrush, W. Van der Stricht, K. Jacobs, and I. Moerman, "Indium segregation in InGaN quantum-well structures," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 76, no. May 2015, p. 1600, 2000.
- [49] G. Jacopin, A. De Luna Bugallo, P. Lavenus, L. Rigutti, F. H. Julien, L. F. Zagonel, M. Kociak, C. Durand, D. Salomon, X. J. Chen, J. Eymery, and M. Tchernycheva, "Single-Wire Light-Emitting Diodes Based on GaN Wires Containing Both Polar and Nonpolar InGaN/GaN Quantum Wells," *Appl. Phys. Express*, vol. 5, no. 1, p. 014101, Jan. 2012.
- [50] P. Hovington, D. Drouin, and R. Gauvin, "CASINO : A New Monte Carlo Code in C Language for Electron Beam Interaction - Part I : Description of the Program," *Scanning*, vol. 19, pp. 1–14, 1997.
- [51] P. Hovington, D. Drouin, R. Gauvin, D. C. Joy, and N. Evans, "CASINO : A New Monte Carlo Code in C Language for Electron Beam Interactions - Part III: Stopping Power at Low Energies," vol. 19, pp. 29–35, 1997.
- [52] D. Drouin, P. Hovington, and R. Gauvin, "CASINO : A New Monte Carlo Code in C Language for Electron Beam Interactions -Part II : Tabulated Values of the Mott Cross Section," vol. 19, pp. 20–28, 1997.
- [53] J. . Muth, J. H. Lee, I. K. Shmagin, R. M. Kolbas, H. C. Casey, J. B. P. Keller, U. K. Mishra, and S. P. DenBaars, "Absorption coefficient, energy gap, exciton binding energy, and recombination lifetime of GaN obtained from transmission measurements," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 71, no. 18, pp. 2572–2574, 1997.
- [54] M. a. Reshchikov and H. Morkoç, "Luminescence properties of defects in GaN," *J. Appl. Phys.*, vol. 97, no. 6, p. 061301, 2005.

- [55] M. Reshchikov, G.-C. Yi, and B. Wessels, "Behavior of 2.8- and 3.2-eV photoluminescence bands in Mg-doped GaN at different temperatures and excitation densities," *Phys. Rev. B*, vol. 59, no. 20, pp. 13176–13183, May 1999.
- [56] Y. S. Park, M. J. Holmes, T. W. Kang, and R. a Taylor, "Quantum confined Stark effect of InGaN/GaN multi-quantum disks grown on top of GaN nanorods.," *Nanotechnology*, vol. 21, no. 11, p. 115401, Mar. 2010.
- [57] D. Camacho Mojica and Y.-M. Niquet, "Stark effect in GaN/AlN nanowire heterostructures: Influence of strain relaxation and surface states," *Phys. Rev. B*, vol. 81, no. 19, pp. 1–10, May 2010.
- [58] M. J. Holmes, Y. S. Park, J. H. Warner, and R. a. Taylor, "Quantum confined Stark effect and corresponding lifetime reduction in a single In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N quantum disk," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 95, no. 18, p. 181910, 2009.
- [59] F. Stokker-Cheregi, a. Vinattieri, E. Feltin, D. Simeonov, J. Levrat, J.-F. Carlin, R. Butté, N. Grandjean, and M. Gurioli, "Impact of quantum confinement and quantum confined Stark effect on biexciton binding energy in GaN/AlGaIn quantum wells," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 93, no. 15, p. 152105, 2008.
- [60] K. Kumakura, T. Makimoto, N. Kobayashi, T. Hashizume, T. Fukui, and H. Hasegawa, "Minority carrier diffusion length in GaN: Dislocation density and doping concentration dependence," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 86, no. 5, p. 052105, 2005.
- [61] L. Chernyak, A. Osinsky, V. Fuflyigin, and E. F. Schubert, "Electron beam-induced increase of electron diffusion length in p-type GaN and AlGaIn/GaN superlattices," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 77, no. 6, p. 875, 2000.
- [62] F. Binet, J. Y. Duboz, N. Laurent, E. Rosencher, O. Briot, and R. L. Aulombard, "Properties of a photovoltaic detector based on an n-type GaN Schottky barrier," *J. Appl. Phys.*, vol. 81, no. 9, pp. 6449–6455, 1997.
- [63] X. Zhang, P. Kung, D. Walker, J. Piotrowski, A. Rogalski, A. Saxler, and M. Razeghi, "Photovoltaic effects in GaN structures with p-n junctions," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 67, no. 14, pp. 2028–2031, 1995.
- [64] M. Leroux, B. Beaumont, N. Grandjean, P. Lorenzini, S. Haffouz, P. Venegues, J. Massies, and P. Gibart, "Luminescence and reflectivity studies of undoped, n- and p-doped GaN on (0001) sapphire," *Mater. Sci. Eng. B*, vol. 50, no. 1–3, pp. 97–104, Dec. 1997.
- [65] M. Feneberg, S. Osterburg, K. Lange, C. Lidig, B. Garke, R. Goldhahn, E. Richter, C. Netzel, M. D. Neumann, N. Esser, S. Fritze, H. Witte, J. Bläsing, A. Dadgar, and A. Krost, "Band gap renormalization and Burstein-Moss effect in silicon- and germanium-doped wurtzite GaN up to 1020 cm<sup>-3</sup>," *Phys. Rev. B*, vol. 90, p. 075203, 2014.
- [66] J. K. Sheu, Y. K. Su, G. C. Chi, P. L. Koh, M. J. Jou, C. M. Chang, C. C. Liu, and W. C. Hung, "High-transparency Ni/Au ohmic contact to p-type GaN," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 74, no. 16, p. 2340, 1999.

- [67] D.-F. Wang, F. Shiwei, C. Lu, A. Motayed, M. Jah, S. N. Mohammad, K. a. Jones, and L. Salamanca-Riba, "Low-resistance Ti/Al/Ti/Au multilayer ohmic contact to n-GaN," *J. Appl. Phys.*, vol. 89, no. 11, p. 6214, 2001.
- [68] R. J. Molnar, T. Lei, and T. D. Moustakas, "Electron transport mechanism in gallium nitride," vol. 62, no. January, pp. 72–74, 1993.
- [69] G. Franssen, E. Litwin-Staszewska, R. Piotrkowski, T. Suski, and P. Perlin, "Optical and electrical properties of homoepitaxially grown multiquantum well InGaN/GaN light-emitting diodes," *J. Appl. Phys.*, vol. 94, no. 2003, pp. 6122–6128, 2003.
- [70] P. Rappaport, "The Electron-voltaic Effect in p-n Junctions Induced by Beta-Particle Bombardment," *Phys. Rev.*, vol. 93, pp. 246–247, 1954.
- [71] J. Lander, H. Schreiber, T. M. Buck, and J. R. Mathews, "Microscopy in Internal Crystal Imperfections in Si p-n Junction Diodes by Use of Electron Beams," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 3, pp. 206–207, 1963.
- [72] C. Donolato, "Contrast formation in SEM charge-collection images of semiconductor defects," *Scan. Electron Microsc.*, vol. 1, pp. 257–266, 1979.
- [73] E. Miyazaki and K. Miyaji, "Enhancement of Reverse Current in Semiconductor Diodes by Electron Bombardment," *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 2, pp. 129–130, 1963.
- [74] W. Shockley, "Problems related to p-n junctions in silicon," *Solid. State. Electron.*, vol. 2, no. 1, pp. 35–67, 1961.
- [75] L. C. Kimerling, H. J. Leamy, and J. R. Patel, "The electrical properties of stacking faults and precipitates in heat-treated dislocation-free Czochralski silicon," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 30, no. 5, p. 217, 1977.
- [76] H. J. Leamy, "Charge collection scanning electron microscopy," *J. Appl. Phys.*, vol. 53, no. 6, p. R51, 1982.
- [77] J. C. Gonzalez, K. L. Bunker, and P. E. Russell, "Minority-carrier diffusion length in a GaN-based light-emitting diode," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 79, no. 10, p. 1567, 2001.
- [78] G. Moldovan, P. Kazemian, P. R. Edwards, V. K. S. Ong, O. Kurniawan, and C. J. Humphreys, "Low-voltage cross-sectional EBIC for characterisation of GaN-based light emitting devices," *Ultramicroscopy*, vol. 107, no. 4–5, pp. 382–9, 2007.
- [79] C. L. Progl, C. M. Parish, J. P. Vitarelli, and P. E. Russell, "Analysis of V defects in GaN-based light emitting diodes by scanning transmission electron microscopy and electron beam induced current," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 92, no. 24, p. 242103, 2008.
- [80] K. L. Bunker, "Thèse : Development and Application of Electron Beam Induced Current and Cathodoluminescence Analytical Techniques for Characterization of Gallium Nitride-based Devices," North Carolina State University, 2004.
- [81] A. Gustafsson, M. T. Björk, and L. Samuelson, "Locating nanowire heterostructures by electron beam induced current," *Nanotechnology*, vol. 18, no. 20, p. 205306, May 2007.

- [82] C. Y. Chen, A. Shik, A. Pitanti, A. Tredicucci, D. Ercolani, L. Sorba, F. Beltram, and H. E. Ruda, "Electron beam induced current in InSb-InAs nanowire type-III heterostructures," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 101, no. 6, p. 063116, 2012.
- [83] C.-C. Chang, C.-Y. Chi, M. Yao, N. Huang, C.-C. Chen, J. Theiss, A. W. Bushmaker, S. Lalumondiere, T.-W. Yeh, M. L. Povinelli, C. Zhou, P. D. Dapkus, and S. B. Cronin, "Electrical and optical characterization of surface passivation in GaAs nanowires.," *Nano Lett.*, vol. 12, no. 9, pp. 4484–9, Sep. 2012.
- [84] C. Gutsche, R. Niepelt, M. Gnauck, A. Lysov, W. Prost, C. Ronning, and F.-J. Tegude, "Direct determination of minority carrier diffusion lengths at axial GaAs nanowire p-n junctions.," *Nano Lett.*, vol. 12, no. 3, pp. 1453–8, Mar. 2012.
- [85] M. Tchernycheva, L. Rigutti, G. Jacopin, A. de Luna Bugallo, P. Lavenus, F. H. Julien, M. Timofeeva, a D. Bouravleuv, G. E. Cirlin, V. Dhaka, H. Lipsanen, and L. Largeau, "Photovoltaic properties of GaAsP core-shell nanowires on Si(001) substrate.," *Nanotechnology*, vol. 23, no. 26, p. 265402, Jul. 2012.
- [86] L. Yu, L. Rigutti, M. Tchernycheva, S. Misra, M. Foldyna, G. Picardi, and P. Roca i Cabarrocas, "Assessing individual radial junction solar cells over millions on VLS-grown silicon nanowires.," *Nanotechnology*, vol. 24, no. 27, p. 275401, Jul. 2013.
- [87] P. Tchoulfian, F. Donatini, F. Levy, a Dussaigne, P. Ferret, and J. Pernot, "Direct Imaging of p-n Junction in Core-Shell GaN Wires.," *Nano Lett.*, May 2014.
- [88] S. Li and A. Waag, "GaN based nanorods for solid state lighting," *J. Appl. Phys.*, vol. 111, no. 7, p. 071101, 2012.
- [89] D. Zubia and S. D. Hersee, "Nanoheteroepitaxy: The Application of nanostructuring and substrate compliance to the heteroepitaxy of mismatched semiconductor materials," *J. Appl. Phys.*, vol. 85, no. 9, p. 6492, 1999.
- [90] S. Raychaudhuri and E. T. Yu, "Critical dimensions in coherently strained coaxial nanowire heterostructures," *J. Appl. Phys.*, vol. 99, no. 11, p. 114308, 2006.
- [91] H.-M. Kim, Y.-H. Cho, H. Lee, S. Il Kim, S. R. Ryu, D. Y. Kim, T. W. Kang, and K. S. Chung, "High-Brightness Light Emitting Diodes Using Dislocation-Free Indium Gallium Nitride/Gallium Nitride Multiquantum-Well Nanorod Arrays," *Nano Lett.*, vol. 4, no. 6, pp. 1059–1062, Jun. 2004.
- [92] F. Limbach, C. Hauswald, J. Lähnemann, M. Wölz, O. Brandt, a Trampert, M. Hanke, U. Jahn, R. Calarco, L. Geelhaar, and H. Riechert, "Current path in light emitting diodes based on nanowire ensembles.," *Nanotechnology*, vol. 23, no. 46, p. 465301, Nov. 2012.
- [93] C. A. Klein, "Bandgap Dependence and Related Features of Radiation Ionization Energies in Semiconductors," *J. Appl. Phys.*, vol. 39, no. 4, pp. 2029–2038, 1968.
- [94] T. M. Smeeton, M. J. Kappers, J. S. Barnard, M. E. Vickers, and C. J. Humphreys, "Electron-beam-induced strain within InGaN quantum wells: False indium 'cluster' detection in the transmission electron microscope," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 83, no. 26, p. 5419, 2003.

- [95] [Http://www.gel.usherbrooke.ca/casino/What.html](http://www.gel.usherbrooke.ca/casino/What.html), "Casino." [Online]. Available: <http://www.gel.usherbrooke.ca/casino/What.html>.
- [96] D. C. Joy and S. Luo, "An empirical stopping power relationship for low-energy electrons," *Scanning*, vol. 4, no. 11, pp. 176–180, 1989.
- [97] K. Heinrich, "4th Intl. Cong. on X-ray optics and microanalysis," in *X-ray optics and microanalysis*, 1966, p. 1509.
- [98] Z. Z. Bandić, P. M. Bridger, E. C. Piquette, and T. C. McGill, "Electron diffusion length and lifetime in p-type GaN," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 73, no. 22, p. 3276, 1998.
- [99] S. L. Chuang, *Physics of optoelectronic devices*, Wiley. 1995.
- [100] Z. He, "Review of the Shockley–Ramo theorem and its application in semiconductor gamma-ray detectors," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip.*, vol. 463, no. 1–2, pp. 250–267, May 2001.
- [101] W. Shockley, "Currents to conductors induced by a moving point charge," *J. Appl. Phys.*, no. 9, p. 635, 1938.
- [102] S. Ramo, "Current induced by electron motion," in *Proceedings of I.R.E.*, 1939, p. 584.
- [103] G. Cavalleri, G. Fabri, and V. Svelto, "On the induced charge in semiconductor detectors," *Nucl. Instruments Methods*, no. 21, pp. 177–178, 1963.
- [104] P. Bhattacharya, R. Fornari, and H. Kamimura, Eds., "Comprehensive Semiconductor Science and Technology," in 4, 2011, pp. 308–356.
- [105] B. Chen, J. Chen, T. Sekiguchi, T. Ohyanagi, H. Matsuhata, A. Kinoshita, H. Okumura, and F. Fabbri, "Electron-beam induced current study of stacking faults and partial dislocations in 4H-SiC Schottky diode," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 93, p. 033514, 2008.
- [106] L. Rigutti, I. Blum, D. Shinde, D. Hernández-Maldonado, W. Lefebvre, J. Houard, F. Vurpillot, A. Vella, M. Tchernycheva, C. Durand, J. Eymery, and B. Deconihout, "Correlation of microphotoluminescence spectroscopy, scanning transmission electron microscopy, and atom probe tomography on a single nano-object containing an InGaN/GaN multiquantum well system," *Nano Lett.*, vol. 14, no. 1, pp. 107–114, Jan. 2014.
- [107] J. . Duboz, F. Binet, D. Dolfi, N. Laurent, F. Scholz, J. Off, a Sohmer, O. Briot, and B. Gil, "Diffusion length of photoexcited carriers in GaN," *Mater. Sci. Eng. B*, vol. 50, no. 1–3, pp. 289–295, Dec. 1997.
- [108] E. Monroy, F. Omnès, and F. Calle, "Wide-bandgap semiconductor ultraviolet photodetectors," *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 18, pp. R33–R51, 2003.
- [109] R. Calarco, M. Marso, T. Richter, A. I. Aykanat, R. Meijers, A. V D Hart, T. Stoica, and H. Lüth, "Size-dependent photoconductivity in MBE-grown GaN-nanowires," *Nano Lett.*, vol. 5, no. 5, pp. 981–4, May 2005.



- [110] F. González-Posada, R. Songmuang, M. Den Hertog, and E. Monroy, "Room-temperature photodetection dynamics of single GaN nanowires.," *Nano Lett.*, vol. 12, no. 1, pp. 172–6, Jan. 2012.
- [111] N. a. Sanford, P. T. Blanchard, K. a. Bertness, L. Mansfield, J. B. Schlager, a. W. Sanders, a. Roshko, B. B. Burton, and S. M. George, "Steady-state and transient photoconductivity in c-axis GaN nanowires grown by nitrogen-plasma-assisted molecular beam epitaxy," *J. Appl. Phys.*, vol. 107, no. 3, p. 034318, 2010.

# Publications

---

- M. Tchernycheva, V. Neplock, H. Zhang, P. Lavenus, L. Rigutti, F. Bayle, F. H. Julien, A. Babichev, G. Jacopin, L. Largeau, R. Ciechonski, G. Vescovi and O. Kryliouk, « Core-shell InGaN/GaN nanowire light emitting diodes analyzed by electron beam induced current microscopy and cathodoluminescence mapping », *Nanoscale*, **7**, 11692-11701 (2015)
- P. Lavenus, A. Messanvi, L. Rigutti, ADL Bugallo, H. Zhang, F. Bayle, J. Eymery, C. Durand and M. Tchernycheva, « Experimental and theoretical analysis of transport properties of core-shell light emitting diodes probed by electron beam induced current microscopy », *Nanotechnology*, **25**, 255201 (2014)
- M. Tchernycheva, A. Messanvi, A. de Luna Bugallo, G. Jacopin, P. Lavenus, L. Rigutti, H. Zhang, Y. Halioua, F. H. Julien, J. Emery and C. Durand, « Integrated Photonic Platform Based on InGaN/GaN Nanowire Emitters and Detectors », *Nano Lett.*, **14** (6), 515–3520 (2014)
- M. Tchernycheva, P. Lavenus, H. Zhang, A.V. Babichev, G. Jacopin, M. Shahmohammadi, F. H. Julien, R. Ciechonski, G. Vescovi and O. Kryliouk, « InGaN/GaN Core-Shell Single Nanowire Light Emitting Diodes with Graphene-Based P-Contact », *Nano Lett.*, **14** (5), 2456–2465 (2014)
- G. Jacopin, ADL Bugallo, L. Rigutti, P. Lavenus, F. H. Julien, Yuan-Ting Lin, Li-Wei Tu and M. Tchernycheva, “Interplay of the photovoltaic and photoconductive operation modes in visible-blind photodetectors based on axial p-i-n junction GaN nanowires”, *Applied Physics Letters*, **104**, 023116 (2014)
- H. Zhang, A. V. Babichev, G. Jacopin, P. Lavenus, F. H. Julien, A. Yu Egorov, J. Zhang, T. Pauporté and M. Tchernycheva, « Characterization and modeling of a ZnI nanowire ultraviolet photodetector with graphene transparent contact », *J. Appl. Phys.*, **114**, 234505 (2013)
- A. Babichev, H. Zhang, P. Lavenus, F. H. Julien, A. Yu. Egorov, Y. T. Lin, L. W. Tu and M. Tchernycheva, “GaN nanowire ultraviolet photodetector with a graphene transparent contact”, *Applied Physics Letters*, **103**, 201103 (2013)
- G. Jacopin, A.D.L. Bugallo, P. Lavenus, L. Rigutti, F.-H. Julien, Luiz F. Zagonel, M. Kociak, C. Durand, D. Salomon, X.J. Chen, J. Eymery and M. Tchernycheva, « Single-wire Light Emitting Diodes Based on GaN Wires Containing Both Polar and Nonpolar InGaN/GaN Quantum Wells », *Applied Physics Express*, **5** (1), 014101 (2012)
- M. Tchernycheva, L. Rigutti, G. Jacopin, A.D.L. Bugallo, P. Lavenus, F. H. Julien, M. Timofeeva, A. D. Bouravleuv, G.E. Crilin, V. Dhaka, H. Lipsanen and L. Largeau, “Photovoltaic properties of GaAsP core-shell nanowires on Si(001) substrate”, *Nanotechnology*, **23** (26), 265402 (2012)

- G. Jacopin, L. Rigutti, S. Bellei, P. Lavenus, F. H. Julien, A. V. Davydov, D. Tsetkov, K. A. Bertness, N. A. Sandford, J. B. Schlager and M. Tchernycheva, "Photoluminescence polarization in strained GaN/AlGaN core/shell nanowires", *Nanotechnology*, **23** (32), 325701 (2012)